

VERIFICATION OF TRANSLATION

I, Mikiko Oyanagi

of 6th Fl., Kantetsu Tsukuba-Science-City Bldg. 1-1-1, Oroshi-machi, Tsuchiura, Ibaraki, **JAPAN**

declare as follows:

- That I am well acquainted with both the English and Japanese languages, and 1.
- That the attached document is a true and correct translation made by me to the best of my knowledge and belief of:
- Japanese Patent Application No. Hei 11-192488 (a) Entitled: " HCV POLYMERASES SUITABLE FOR CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS AND METHODS FOR USING THE CRYSTAL STRUCTURES"

Filed on July 7, 1999

(Signature of Translator)

Mikiko Oyanagi

[Document Name] Specification
[Title of the Invention] HCV POLYMERASES SUITABLE FOR CRYSTAL
STRUCTURE ANALYSIS AND METHODS FOR USING THE CRYSTAL STRUCTURES
[Claims]

[Claim 1] A hepatitis C virus (HCV) polymerase of the following (a) or (b):

5

10

15

20

25

30

35

(a) an HCV polymerase consisting of the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1 and an amino acid sequence adjacent to the 570th residue required for column purification; or

(b) an HCV polymerase comprising the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1 wherein one or more amino acids are deleted, substituted, or added, and wherein the HCV polymerase has an RNA-dependent RNA polymerase activity and an amino acid sequence adjacent to the 570th residue required for column purification.

[Claim 2] The HCV polymerase of claim 1, wherein a sulfur atom in methionine (Met) is substituted by a selenium atom.

[Claim 3] A crystal of HCV polymerase comprising the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1.

[Claim 4] A crystal of HCV polymerase comprising the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1, wherein a sulfur atom in methionine (Met) is substituted by a selenium atom.

[Claim 5] A DNA of the following (a) or (b) encoding HCV polymerase:

(a) a DNA which encodes a protein consisting of the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1 and an amino acid sequence adjacent to the 570th residue required for column purification; or (b) a DNA which encodes a protein having an RNA-dependent RNA polymerase activity and comprising the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1, wherein one or more amino acids are deleted, substituted, or added, and an amino acid sequence adjacent to the 570th residue required for column purification.

[Claim 6] A method for determining a structural coordinate of a cocomplex or a variant of HCV polymerase by the molecular replacement method using the structural coordinate of the HCV polymerase of Table 2.

[Claim 7] A method for designing HCV polymerase inhibitors,

which comprises the step of composing a compound having a molecular structure complementary to an HCV polymerase active site and/or an additional inhibitor-binding site from a structure of a test sample using the structural coordinate of the HCV polymerase of Table 2, or a structural coordinate substantially-equivalent thereto, or a part thereof, as well as the structural coordinate of the test sample.

[Claim 8] A method for evaluating an HCV polymerase-inhibiting activity, which comprises the step of comparing complementarity of a test sample to an HCV polymerase active site and/or an additional inhibitor-binding site using the structural coordinate of HCV polymerase of Table 2, or a structural coordinate substantially-equivalent thereto, or a part thereof, as well as the structural coordinate of the test sample.

[Claim 9] A method of screening for an HCV polymerase inhibitor, which comprises the steps of (a) to (c):

- (a) selecting a test sample with a complementarity to an HCV polymerase active site and/or an additional inhibitor-binding site using the structural coordinate of the HCV polymerase of Table 2 as well as the structural coordinate of the test sample;
- (c) contacting the test sample selected in (a); and (c) contacting the test sample synthesized in (b) with the HCV polymerase under the presence of an RNA as a template and a substrate to determine HCV polymerase-inhibiting activity.

[Claim 10] An HCV polymerase inhibitor selected by the method of claim 9.

[Detailed Description of the Invention] [0001]

5

10

15

30

35

[Technical Field of Industrial Application]

The present invention relates to HCV polymerases suitable for crystal structure analysis, and the use of the crystal structures. More specifically, the present invention relates to HCV polymerases that can be mass-produced by genetic recombination and have a stable crystal structure, as well as (a) a method for analyzing the crystal structure of an HCV polymerase variant, (b) a method for analyzing the crystal structure of a cocomplex in which HCV polymerase binds

to an inhibitor, and (c) a method for evaluating an HCV polymerase-inhibiting activity which comprises the step of determining the complementarity of a test sample to an of HCV polymerase active site and/or an additional inhibitor-binding site.

5

10

20

25

30

[0002]

[Prior Art]

Hepatitis C is a grave problem as it is spread by blood transfusion and such, and more than half of the cases become chronic with a high probability of progressing into cirrhosis and hepatoma. A cause of hepatitis C is known to be the hepatitis C virus (HCV), the gene of which was cloned in 1989 by the immunoscreening method using plasma of chimpanzees infected with human plasma (Science, 244, 359-362 (1989)).

15 [0003]

Hepatitis C virus is a positive-strand RNA virus with an envelope and comprises RNA encoding a protein consisting of 3010 amino acids. A precursor protein biosynthesized from the RNA in a host is processed into a structural protein forming viral particles (a core protein and two envelope proteins) and a non-structural protein (NS2, NS3, NS4A, NS4B, NS5A, NS5B) by a cellular signalase and a protease encoded by the virus itself. It has been thought that NS2 and NS3 retain the protease activity and are necessary enzymes for processing the precursor protein, and the helicase of NS3 and RNA-dependent RNA polymerase of NS5B are essential for viral replication.

[0004]

At present, interferon? and interferon? are used for treating HCV, however, these have little or no effect for many patients. Therefore, there is a strong need for a more effective drug. The development of HCV protease-targeting inhibitors is underway, and studies are also being conducted on inhibitors targeting helicase, RNA-dependent RNA polymerase, and such.

An inhibitor for viral proliferation is generally screened by measuring the activity of inhibiting viral proliferation in vitro or in vivo. However, techniques for conducting viral proliferation

of HCV in vitro has not been established yet, and thus, the screening of HCV viral inhibitors is difficult.

In developing inhibitors for enzyme activity, molecular designing of inhibitors has been carried out by computers based on the three-dimensional structure of enzymes to enhance screening efficiency. In this method, candidate compounds are selected and screened, and then the inhibiting activity thereof are determined.

In order to design inhibitory molecules by computers, the crystal structure of an enzyme must be revealed. The crystal structure can be clarified by X-ray analysis. For example, the crystal structures of HIV reverse transcriptase (Nature structural biology, 2, 293-302 (1995); Structure, 3, 365-379 (1995)), interleukin-1? transformation enzyme (WO 95/35367), protease of cytomegalovirus (WO 97/42311), HCV helicase (WO 99/09148), and such, have been analyzed.

Crystal structure analysis using X-rays requires a large amount of enzymes that can be stably crystallized. Thanks to the development of the genetic recombinant technique, a large amount of enzymes can be homogeneously and highly purified. However, it is difficult to obtain enzyme crystals suitable for X-ray analysis, and the structure may not remain stable, even if it was stable at the time of crystallization, and only incomplete structures can be analyzed in many cases. For example, the reported crystal structure of poliovirus RNA-dependent RNA polymerase (Structure 5, 1109-1122 (1997)) is not complete, and only some parts have been analyzed, presumably because the crystallized protein has no stable structure.

[0006]

5

10

15

20

25

30

35

[Problems to Be Solved by the Invention]

An objective of the present invention is to provide HCV polymerases having a stable crystal structure, and DNA encoding the same.

Another objective of the present invention is to analyze the crystal structure of the HCV polymerases, and provide a structural coordinate useful for crystal structure analysis of HCV polymerase variants and such.

Additionally, the present invention provides a method for

evaluating the inhibiting activity of a compound using a computer based on the crystal structure of an HCV polymerase, and a method of screening for HCV polymerase inhibitors using the evaluation method.

5 [0007]

10

20

30

35

[Means to Solve the Problems]

The present inventors discovered that proteins having an addition of an amino acid sequence required for purification at the C-terminus of HCV polymerase are stable even after crystallization. After exhaustive studies, the present inventors successfully clarified the crystal structure to complete the present invention.

Specifically, the present invention provides (1) to (16) as described below.

- (1) A hepatitis C virus (HCV) polymerase of the following (a) or (b):
 - (a) an HCV polymerase consisting of the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1 and an amino acid sequence adjacent to the 570th residue required for column purification; or
 - (b) an HCV polymerase comprising the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1 wherein one or more amino acids are deleted, substituted, or added, and wherein the HCV polymerase has an RNA-dependent RNA polymerase activity and an amino acid sequence adjacent to the 570th residue required for column purification.
- (2) The HCV polymerase of (1), wherein a sulfur atom in methionine (Met) is substituted by a selenium atom.
 - (3) A crystal of HCV polymerase comprising the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1.
 - (4) A crystal of HCV polymerase comprising the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1, wherein a sulfur atom in methionine (Met) is substituted by a selenium atom.
 - (a) a DNA which encodes a protein consisting of the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1 and an amino acid sequence adjacent to the 570th residue required for column purification; or (b) a DNA which encodes a protein having an RNA-dependent RNA polymerase activity and comprising the amino acid sequence from position 1 to

570 of SEQ ID NO: 1, wherein one or more amino acids are deleted, substituted, or added, and an amino acid sequence adjacent to the 570th residue required for column purification.

- (6) A method for determining a structural coordinate of a cocomplex or a variant of HCV polymerase by the molecular replacement method using the structural coordinate of the HCV polymerase of Table 2.
- (7) A method for designing HCV polymerase inhibitors, which comprises the step of composing a compound having a molecular structure complementary to an HCV polymerase active site and/or an additional inhibitor-binding site from a structure of a test sample using the structural coordinate of the HCV polymerase of Table 2, or a structural coordinate substantially-equivalent thereto, or a part thereof, as well as the structural coordinate of the test sample.
- (8) A method for evaluating an HCV polymerase-inhibiting activity, which comprises the step of comparing complementarity of a test sample to an HCV polymerase active site and/or an additional inhibitor-binding site using the structural coordinate of HCV polymerase of Table 2, or a structural coordinate substantially-equivalent thereto, or a part thereof, as well as the structural coordinate of the test sample.
 - (9) A method of screening for an HCV polymerase inhibitor, which comprises the steps of (a) to (c):
 - (a) selecting a test sample with a complementarity to an HCV polymerase active site and/or an additional inhibitor-binding site using the structural coordinate of the HCV polymerase of Table 2 as well as the structural coordinate of the test sample;
 - (b) synthesizing the test sample selected in (a); and
- (c) contacting the test sample synthesized in (b) with the HCV polymerase under the presence of an RNA as a template and a substrate to determine HCV polymerase-inhibiting activity.
 - (10) An HCV polymerase inhibitor selected by the method of (9).

[8000]

5

10

15

20

25

30

35

The terms used herein have the following meanings:
"Amino acid sequence required for column purification" means

an amino acid sequence such as a histidine tag, which can be added to proteins for facilitating absorption to column resins for column purification of the protein. Such a histidine tag requires six or more histidines, more preferably six histidines.

"An amino acid sequence wherein one or more amino acids are deleted, substituted, or added" means an amino acid sequence comprising 1 to 20, preferably 1 to 10, and more preferably 1 to 5 amino acids which are deleted, substituted, or added.

5

10

15

20

25

30

35

"Structural coordinate" is a mathematical coordinate obtained by converting patterns obtained by X-ray diffraction by atoms of HCV polymerase in crystal form into a numerical value. It presents locations of atoms expressed as a three-dimensional coordinate. Specifically, the expression means the structural coordinate shown in Table 2 of Example 2.

"A structural coordinate substantially equivalent to that of HCV polymerase" means a derivative structural coordinate generated as a result of artificially processing the structural coordinate of the HCV polymerase, or a part thereof, by using computers or such. The substantially equivalent structural coordinate preferably includes the structural coordinate shown in Table 2 in which the locations of the atoms are varied within the range of residual mean square deviation ? 0.5 Å or less, and more preferably, ? 0.2 Å or less from the original atoms.

"Molecular replacement method" is a method for determining a phase angle of a protein whose structure is unknown, using as an initial model, the structure of a known protein with the same function. Specific procedures are described in Experimental Chemistry Course 10, Diffraction, Japanese Society of Chemistry, 260-263 (1992), or Methods in Enzymology, 115, 55-77 (1985), edited by M. G. Rossman.

"Cocomplex" means a complex formed by HCV polymerase and a compound having HCV polymerase-inhibiting activity. Cocomplexes include those formed by cocrystals, and those formed by soaking HCV polymerase crystals in a solution containing a compound having HCV polymerase-inhibiting activity.

"Active site" means (1) the region of HCV polymerase in which RNA is replicated using HCV template primer RNA, formed by Asp at

positions 220, 318, and 319, Lys 144, and Arg 158 in the amino acid sequence encoding the HCV polymerase, and/or (2) a hydrophilic, shallow hollow formed by Ser 282, Thr 287, and Asn 291.

"Additional inhibitor-binding site" is not an RNA replication site, but a space generated in the HCV polymerase when RNA is replicated using HCV template primer RNA as a template, and formed by the regions of amino acid residues 213 to 223, 310 to 325, and 348 to 366. These regions include those having 1 to 20, preferably 1 to 10, and more preferably 1 to 5 amino acid shifts towards the N- or C-terminal side.

"A part of a structural coordinate" means a structural coordinate including structures of the active site and/or additional inhibitor-binding site.

"Complementarity to an active site and/or an additional inhibitor-binding site" is determined by calculating the state in which a test sample is integrated conformationally or energically into an active site and/or an additional inhibitor-binding site, and converting into a numerical value, the binding stability of the test sample to the active site and/or additional inhibitor-binding site, or visually modeling the binding stability.

20 [0009]

5

10

15

25

30

The present invention is illustrated simply below.

The present invention provides HCV polymerases suitable for crystal structure analysis, and methods for using the crystal structure.

More specifically, the present invention relates to HCV polymerases that can be mass-produced by genetic recombination and have a stable crystal structure, as well as (a) a method for analyzing the crystal structure of an HCV polymerase variant, (b) a method for analyzing the crystal structure of a cocomplex in which HCV polymerase bound to an inhibitor, and (c) a method for evaluating an HCV polymerase-inhibiting activity which comprises the step of determining the complementarity of a test sample to an of HCV polymerase active site and/or an additional inhibitor-binding site.

[0010]

HCV polymerases suitable for crystal structure analysis and genes thereof

The HCV polymerases suitable for crystal structure analysis of the present invention comprise (a) an HCV polymerase consisting of the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1 and an amino acid sequence adjacent to the 570th residue required for column purification; and (b) HCV polymerase comprising the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1, wherein one or more amino acids are deleted, substituted, or added, which has an RNA-dependent RNA polymerase activity, and an amino acid sequence adjacent to the 570th residue required for column purification.

5

10

15

20

25

30

35

HCV polymerases of the present invention can be prepared by standard genetic recombinant techniques.

Specifically, a DNA encoding an HCV polymerase, which consists of DNAs encoding an amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1 and an amino acid sequence adjacent to 570th residue required for column purification, is inserted into a vector. The vector is used to transform, for example, *E. coli*, and the resulting transformants are cultured to isolate the HCV polymerase.

In the polymerase as described above, the amino acid sequence of a known HCV polymerase have been replaced by amino acids which are bound to linkers and are required for column purification. Such a sequence makes purification easy and enables stable crystallization.

The crystals of the obtained HCV polymerase recombinant can be grown by vapor diffusion and used for crystal structure analysis. Furthermore, a cocrystal comprising the polymerase and a compound having HCV polymerase-inhibiting activity, or a crystal prepared by soaking the polymerase in a solution of the compound can also be used for crystal analysis of the cocomplex.

[0011]

It is generally known that even if an amino acid sequence of a protein having a certain physiological activity is slightly modified, for example, by deletion, substitution of one or more amino acids in the amino acid sequence, or addition of one or more amino acids to the amino acid sequence, the physiological activity of the protein may be retained. Therefore, an HCV polymerase comprising the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1, wherein one or more amino acids are deleted, substituted, or added, which has

an RNA-dependent RNA polymerase activity, and an amino acid sequence adjacent to the 570th residue required for column purification is included in the scope of the present invention.

A variant generated by deletion, substitution, or addition of amino acid, can be prepared by, for example, subjecting the gene encoding the amino acids to site-directed mutagenesis known in the art (for example, Nucl. Acid Research, Vol. 10, No. 20, 6487-6500, 1992).

5

10

15

20

30

35

For example, site-directed mutagenesis can be performed by using synthetic oligonucleotide primers complementary to the single-stranded phage DNA to be subjected to a desirable and specific mutagenesis. In addition to site-directed mutagenesis, methods for deleting, substituting, or adding amino acid sequences include methods in which a gene is treated with a mutagen, or methods in which a gene is cleaved with a restriction enzyme, and a selected gene fragment is removed, added, or substituted, and ligated.

A variant may include a conservatively substituted sequence, meaning that a specific amino acid residue may be substituted by a residue with similar physiochemical properties. Unrestricted examples of a conservative substitution include substitution among amino acid residues with an aliphatic chain, such as substitution among Ile, Val, Leu, or Ala, or substitution between Lys and Arg which are basic amino acids having a polar group.

The present invention also provides DNA encoding an HCV polymerase suitable for crystal structure analysis.

Specifically, (a) DNA encoding an HCV polymerase consisting of DNAs encoding the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1 and an amino acid sequence adjacent to the 570th residue required for column purification, and (b) DNA encoding an HCV polymerase comprising DNA encoding the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1, wherein one or more amino acids are deleted, substituted, or added, which has an RNA-dependent RNA polymerase activity, and an amino acid sequence adjacent to the 570th residue required for column purification.

Since an amino acid can be encoded by more than one codon, any DNA having a nucleotide sequence can be included within the scope

of the present invention as long as the encoded amino acid sequence is identical. Therefore, the DNA of the present invention includes any DNA encoding the amino acid sequence of SEQ ID NO: 1. Additionally, as described above, it is generally known that, when an amino acid sequence of a physiologically active protein is slightly modified, the physiological activity of the protein may be retained. Therefore, DNA encoding an HCV polymerase comprising the amino acid sequence from position 1 to 570 of SEQ ID NO: 1, wherein one or more amino acids are deleted, substituted, or added, which has an RNA-dependent RNA polymerase activity, and an amino acid sequence adjacent to the 570th amino acid residue required for column purification, is included in the present invention. The number of amino acids that are deleted, substituted, or added are 1 to 20 amino acids, preferably 1 to 10 amino acids, and more preferably 1 to 5 amino acids.

15 [0013]

5

10

20

25

30

35

To analyze the crystal structure of an HCV polymerase by the multiple heavy atom isomorphous replacement method, the HCV polymerase (native HCV polymerase) of SEQ ID NO: 1 was produced and purified by the genetic recombination method.

Additionally, selenoMet HCV polymerase (hereinafter referred to as the SeMet HCV polymerase or the SeMet heavy atom substitution product) in which a sulfur of Met of SEQ ID NO: 1 was substituted with selenium was isolated and purified by culturing transformants that resulted from genetic recombination in a medium in which selenomethionine (hereinafter referred to as SeMet) was added in place of Met.

[0014]

Crystal structure analysis of HCV polymerases

Each crystal of the native HCV polymerase and the selenoMet HCV polymerase was obtained by vapor diffusion. Heavy atom substitution products of each can be prepared by soaking the crystals of the native HCV polymerase in solutions containing platinum, uranium, and osmium. A structural coordinate can be determined by measuring diffraction intensity for the crystals of the obtained heavy atom substitution products and calculating the phase angle by the multiple heavy atom

isomorphous replacement method.

The multiple heavy atom isomorphous replacement method is a method for determining the phase angle of native proteins, comprising comparing diffraction intensity data of protein crystals to which a heavy atom is attached, and that of native protein crystals to which a heavy atom is not attached (a native protein), obtained by x-ray analysis (Experimental Chemistry Course 10, Diffraction, Japanese Society of Chemistry, 253-260 (1992)).

According to the principle of the multiple heavy atom isomorphous replacement method, there is a relationship between each reflection of a structural factor from crystals with a heavy atom (F_{PH}) , a structural factor of the native crystal data (F_P) , and contribution of the introduced heavy atom (F_H) :

[Formula 1] $F_{PH} = F_P + F_H$

15

20

25

30

35

10

5

 $||F_{PH}||$ and $||F_{P}||$ are numerical values obtained from the experiment. From these data, the location of the heavy atom can be determined, and $||F_{H}||$ can be calculated to determine the phase angle of each reflection. Subsequently, the structures of the HCV polymerases were determined by obtaining the electron density.

These calculations can be performed using program software DENZO, Shelx, MLPHARE, SHARP, DM, O, etc. The structural coordinates are shown in Table 2 of Example 2.

It is known that in general, even if a structural coordinate for the location of each atom is changed to some extent on a computer, the structure does not largely change and the protein activity is notlost. Therefore, structural coordinates substantially equivalent to those for the HCV polymerases of the present invention include derivative structural coordinates prepared by artificially processing the structural coordinates of the HCV polymerases. Such derivative structural coordinates preferably include those shown in Table 2 in which the locations of the atoms are varied within the range of residual mean square deviation \pm 0.5 Å or less, and more preferably, \pm 0.2 Å or less from an original structural coordinate.

The structure of an HCV polymerase is shown in Fig. 1, consisting of Finger, Palm, Thumb, and Holder domains. The structure of the known

poliovirus polymerase (Structure 5, 1109-1122 (1997)) comprises Finger, Palm, and Thumb domains and the structures of Finger and Holder domains in HCV polymerase have not been revealed.

5 [0015]

10

15

20

25

Determination of the active site and "RNA binding cleft" of the HCV polymerase

The Palm domain of the HCV polymerase was revealed to have a structure similar to HIV reverse transcriptase, *E. coli* or Taq DNA-dependent DNA polymerase, and T7 DNA-dependent polymerase. Comparison of the conserved amino acids sequences between the active sites of these known Palm domains and the Palm domain of the HCV polymerase revealed that the active site is the space formed by Asp 220, 318, and 319, Lys 141, and Arg 158, and/or (2) the hydrophilic shallow cavity formed by Ser 282, Thr 287, and Asn 291.

The Thumb domain of the HCV polymerase can structurally move against the Palm and Finger domains and this movement results in the inner space of the Palm domain. This space was confirmed to be formed by the regions of amino acids 213 to 223, 310 to 325, and 348 to 366, by considering the crystal structure thereof. A compound existing in this space presumably inhibits spatial formation. It is rationally assumed that the above-described region of the Palm domain is an additional inhibitor-binding site. The inner space was revealed to be an additional inhibitor-binding site for HCV polymerase. The region may thus shift 1 to 20, preferably 1 to 10, and more preferably 1 to 5 amino acids.

The structural coordinate for the HCV polymerase can be used for the following purposes:

- (a) for analyzing the crystal structure of a HCV polymerase variant;
- 30 (b) for analyzing the crystal structure of the cocomplex of an HCV polymerase bound to an inhibitor; and
 - (c) for evaluating the complementarity of a compound with the active site and/or the additional inhibitor-binding site of an HCV polymerase.

35 [0016]

Crystal structure analysis of a variant or a cocomplex of the HCV

polymerase

5

10

15

25

30

35

Using the structural coordinate for the HCV polymerase shown in Table 2 as models, the phase angle of a variant or a cocomplex of HCV polymerase can be determined. The structural coordinate for the cocomplex can be important information for enhancing the quality of designing and evaluating a compound having a complementarity with the HCV polymerase active site and/or the additional inhibitor-binding site.

In the molecular replacement method, rotational function is calculated from the crystal diffraction intensity data of the variant or the cocomplex of the HCV polymerase and model to determine the orientation of the molecule, and the location of the molecule is determined by calculating the translational function (Acta Crystallogr., 23, 544 (1967)).

This method can be performed by using Amore of program software CCP4 (Council for the Central Laboratory of the Research Councils), Almn of CCP4, etc.

[0017]

Designing of compounds having HCV polymerase-inhibiting activity and evaluating the inhibiting activity

Since RNA replication is carried out in the active site of HCV polymerase, a compound having structural complementarity with the active site would inhibit the polymerase activity. A compound having a complementarity with an additional inhibitor-binding site is presumed to indirectly inhibit polymerase activity.

Such information on the active site and the additional inhibitor-binding site is important for selecting compounds having an HCV polymerase-inhibiting activity using computers and such. Specifically, the binding stability (complementarity) of compounds having HCV polymerase-inhibiting activity with the active site and/or the additional inhibitor-binding site can be compared for selection using computers and such. A leading compound having a complementarity with the active site and/or the additional inhibitor-binding site, and the derivative peripheral compounds can be rationally designed. Furthermore, in synthesis experiments, useless syntheses can be

obviated, and biological activity tests can be efficiently performed.

Complementarity with the active site and/or the additional inhibitor-binding site can be determined, for example, by inputting the structural coordinates of an HCV polymerase and of a test sample to virtual screening programs such as DOCK4 (UCSF) using computers, and obtaining a state in which the test sample is incorporated into the HCV polymerase active site and/or the additional inhibitor-binding site, as a numerical value stable in terms of conformation and energy, or as a visual model. Moreover, the complementarity of the test sample can be obtained using a part of the structural coordinate for the HCV polymerase.

As a virtual screening program, FLEXY DOCK (Tripos) can be used in addition to DOCK4.

As the structural coordinate for the test sample, one obtained from a database having three-dimensional structures of chemical compounds can be used. Alternatively, data obtained by calculating the three-dimensional conformation using program software such as Quanta, Sybyl (Tripos), Insight II (MSI) can be used.

The HCV polymerase-inhibiting activity can be evaluated by comparing the thus-obtained complementarity with the active site and/or the additional inhibitor-binding site of the HCV polymerase.

The molecule of an inhibitor can be designed so as to have the complementarity with the active site and/or the additional inhibitor-binding site, based on the structure of the test sample. The molecules can be designed using the above-described program software Quanta, Sybyl, Insight II, DOCK4, FLEXY DOCK, etc.

[0018]

5

10

15

20

25

3 0

35

Screening of an HCV polymerase inhibitor

The HCV polymerase-inhibiting activity can be measured by synthesizing a compound having complementarity with the active site of the HCV polymerase evaluated by the above-described virtual screening, and contacting the synthesized compound with the HCV polymerase in the presence of a template RNA and a substrate ribonucleoside triphosphate (rNTP).

The present invention is specifically illustrated below.

[0019]

5

10

15

20

25

30

3 5

[Example 1]

Expression and purification of the native HCV polymerase

As the DNA fragment to be used, a cDNA comprising the His-tag consisting of GSHHHHHH at the C-terminus (SEQ ID NO: 2) was prepared by PCR, using as a template, pDEM22 into which cDNA of HCV-BK was introduced (purchased from the Research Institute for Microbial Diseases of Osaka University), and a set of primers 5BNdel1FW (SEQ ID NO: 3) and 5B570HRV (SEQ ID NO: 4). The resulting fragment was inserted into pCR2.1 vector, the sequence was confirmed, and an approximately 1.8 kDa fragment was obtained by partial digestion with Nde1 and E. coR1.

The thus-obtained fragment was inserted into the NdeI and EcoRI sites in pET17b vector comprising T7 promoter (NOVAGEN), and the vector was used to transform $E.\ coli$ BL21 (DE3) (NOVAGEN).

The transformants were cultured in 2x YT medium at $30\,^{\circ}\text{C}$. When OD_{620} reached 0.8 to 1.0, IPTG was added thereto to a final concentration of 0.5 mM, and the transformants were further incubated at $30\,^{\circ}\text{C}$ for 3 hours to induce production of the target protein.

The resulting cultures were disrupted with a microfluidizer and the soluble fraction thereof was isolated and purified by subsequently adding Ni-NTA agarose thereto, eluting with Mono-S 5/5 (PHARMACIA), and performing gel filtration with Sephacryl S-200 (PHARMACIA).

By analyzing the amino acid sequence of the obtained native HCV polymerase and SeMet heavy atom substitution product, Met at the N-terminus were found to be cleaved. The amino acid sequence is shown in SEQ ID NO: 1.

Expression and purification of SeMet heavy atom substitution product

In the same manner as in the expression and purification of the native HCV polymerase, the 1.8 kD fragment obtained from pDEM22 was inserted into NdeI and EcoRI sites of pET17b (NOVAGEN), which was used to transform E. coli B834 (DE3) (NOVAGEN).

The resulting transformants were cultured in the medium for SeMet substitution in Table 1 at 30 $^{\circ}$ C. When OD₆₂₀ reached 0.8 to 1.0, IPTG

was added thereto to a final concentration of 0.5 mM, and the transformants were further cultured at $30\,^{\circ}\text{C}$ for 3 hours to induce the production of the target protein. The soluble fraction was purified in the same manner as the native HCV polymerase.

5

[Table 1]

Composition of the medium for SeMet substitution

1. Amino acids (g/ml)			•
Ala	1.50	Leu	0.70
Arg	1.75	Lys.HCl	1.26
Asp	1.20	Phe	0.40
Cys. HC1/H ₂ O	0.10	Pro	0.30
Glu ·	2.00	Ser	6.25
Gln	1.00	Thr	0.70
Gly	1.63	Tyr	0.50
His	0.18	Val	0.70
Ile	0.70		
2. Salts (g/ml)			
Adenosine	1.00	$Na-Ac.3H_2O$	1.50
Guanosine	1.33	Am - Cl	1.50
Thymine	0.33	NaOH	0.85
Uracil	1.00	K ₂ HPO ₄	10.50
Succinic acid	3.00		
3. Metal, selenomethionin	e, and ot	thers	
$MgSO_4.7H_2O$	0.25	Glucose	20.00
FeSO ₄ .7H ₂ O	0.0042	SeMet	0.75
4. Vitamins			
KAO and MICHAYLUK BASAI	VITAMIN	solution	10.00 ml/l

Metatthe N-terminus in the SeMetheavy atom substitution product
was cleaved like in the native HCV polymerase. Additionally, as a
result of LC-MS, all sulfur atoms of 12 methionines were replaced
by SeMet.

[0020]

15 [Example 2]

Crystal structure analysis of the HCV polymerase

The resulting native HCV polymerase was crystallized by vapor diffusion in a solution containing 21 to 28% (w/v) polyethylene glycol 4000, 0.2 to 0.35 Mammonium acetate, 0.1 M sodium acetate (NaH acetate), and 0.02 M TES (pH 6.0 to 7.5) at 22.5 °C for 2 to 4 weeks. The crystals were then soaked in a solution the composition of which is described above containing heavy atoms, such as platinum, uranium, or osmium, to obtain each heavy atom substitution products.

SelenoMet HCV polymerase was also crystallized by vapor diffusion in the solution containing 21 to 28% (w/v) polyethylene glycol 4000, 0.2 to 0.35 M ammonium acetate, 0.1 M sodium acetate (NaH acetate), and 0.02 M TES (pH 6.0 to 7.5) at $22.5\,^{\circ}$ C for 2 to 4 weeks.

10

15

20

25

30

35

Diffraction intensity of the obtained platinum heavy atom substitution product, uranium heavy atom substitution product, and osmium heavy atom substitution product, as well as the selenoMet HCV polymerase were measured using Raxis IIc (Rigaku), and BL6B of synchrotron facility KEK-PF, and BL45XU of SPring-8.

The X-ray data for the platinum heavy atom substitution product, the uranium heavy atom substitution product, and the osmium heavy atom substitution product were processed with program software DENSO (HKL) and SCALA of program software CCP4 (Council for the Central Laboratory of the Research Councils) for determining the phase angle of each atom. The first locations of the heavy atoms were determined from the data of the uranium heavy atom substitution product and the osmium heavy atom substitution product with Shelx (Professor Sheldrick; Crystallographic Computing 3, Clarendon Press, Oxford 184 - 189 (1985)). Subsequently, the locations of each heavy atom were determined using the program software MLPHARE in CCP4 and SHARP (Buster). The electron density and expansion of the phase within 2.5 Å were calculated using the program software DM in CCP4 to prepare the Fourier map.

The SeMet HCV polymerase comprises the amino acid sequence of SEQIDNO: 1 in which seleniums bind to 12 Met residues. The differential Fourier map was prepared for this SeMet HCV polymerase in the same manner as described above. The differential Fourier map measured at ? = 1.0400 Å to ? = 0.9797 Å, in which 11 peaks were confirmed, was used as a guide for the structure determination.

The structure of the HCV polymerase was determined based on the obtained Fourier map data using the program software O (DatOno AB).

Refinement and model construction was performed using torsion angle or maximum likelihood refinement of the program software X-PLOR98 (MSI). Ramachandran plot obtained by using the program software PROCHECK (J. Appl. Cryst. 26, 283-290 (1993)) confirmed that there was no amino acid residue with unacceptable structure.

The structural coordinates were shown in Table 2.

10 [0021]
 [Table 2]
 Molecular coordinates of structure of the HCV polymerase

5

	Morecu	I a I	-001	ullic	ices or	SCIUCLUI	C OI C	ic iicv	porymerabe
		Atom	typ	е	Numbers	Χ	Υ	Z	Occ B
	atom	1	CB	SER	1	24. 595	6. 355	-7 . 700	1. 00 14. 36
15	atom	2	0G	SER	1	24. 403	6. 849	-6. 395	1. 00 33. 57
	atom	3	C	SER	1	24. 205	3. 980	-7. 261	1. 00 18. 80
	atom	4	0	SER	1	23. 777	3. 593	-6. 173	1. 00 22. 06
	atom	5	N	SER	1	22. 311	5. 540	-7. 354	1. 00 17. 96
	atom	6	CA	SER	1	23. 641	5. 209	-7. 924	1. 00 16. 04
2 0	atom	7	N	MET	2	25. 181	3. 368	-7. 917	1. 00 19. 98
	atom	8	CA	MET	2	25. 812	2. 175	-7. 382	1. 00 17. 12
	atom	9	CB	MET	2	26. 317	1. 276	-8. 522	1. 00 14. 48
	atom	10	CG	MET	2	25. 215	0. 731	-9. 392	1. 00 12. 07
	atom	11	SD	MET	2	24. 201	-0. 549	-8. 622	1. 00 14. 36
2 5	atom	12	CE	MET	2	25. 522	-1. 728	-8. 316	1. 00 15. 13
	atom	13	C	MET	2	26. 976	2. 612	-6. 501	1. 00 16. 76
	atom	14	0	MET	2	27. 731	3. 510	-6. 858	1. 00 19. 33
	atom	15	N	SER	3	27. 092	1. 988	-5. 341	1. 00 16. 24
	atom	16	CA	SER	3	28. 172	2. 277	-4. 411	1. 00 15. 30
3 0	atom	17	CB	SER	3	28. 103	1. 275	-3. 252	1. 00 10. 19
	atom	18	0G	SER	3	28. 201	-0. 061	-3. 723	1. 00 12. 95
	atom	19	C	SER	3	29. 522	2. 145	-5. 150	1. 00 14. 45
	atom	20	0	SER	3	30. 470	2. 880	-4. 885	1. 00 13. 89
	atom	21	N	TYR	4	29. 593	1. 196	-6. 075	1. 00 14. 55
3 5	atom	22	CA	TYR	4	30. 808	0. 968	-6. 849	1. 00 19. 90
	atom	23	CB	TYR	4	31. 730	-0. 024	-6. 161	1. 00 23. 29

	atom	24	CG	TYR	4	32. 040	0. 242	-4. 734	1. 00 25. 80
	atom	25	CD1	TYR	4	31. 257	-0. 317	-3. 714	1. 00 23. 72
	atom	26	CE1	TYR	4	31. 615	-0. 171	-2. 388	1. 00 23. 05
	atom	27	CD2	TYR	4	33. 180	0. 958	-4. 387	1. 00 23. 13
5	atom	28	CE2	TYR	4	33. 542	1. 108	-3. 067	1. 00 26. 87
	atom	29	CZ	TYR	4	32. 760	0. 533	-2. 075	1. 00 23. 63
	atom	30	ОН	TYR	4	33. 171	0. 637	-0. 772	1. 00 29. 59
	atom	31	С	TYR	4	30. 620	0. 399	-8. 248	1. 00 16. 78
	atom	32	0	TYR	4	29. 610	-0. 230	-8. 578	1. 00 12. 24
10	atom	33	N	THR	5	31. 653	0. 599	-9. 048	1. 00 16. 02
	atom	34	CA	THR	5	31. 695	0. 049	-10. 381	1. 00 18. 47
	atom	35	СВ	THR	5	31. 527	1. 110	-11. 463	1. 00 18. 54
	atom	36	0G1	THR	5	30. 136	1. 399	-11. 615	1. 00 14. 33
	atom	37	CG2	THR	5	32. 067	0. 600	-12. 796	1. 00 21. 94
15	atom	38	С	THR	5	33. 076	-0. 534	-10. 449	1. 00 16. 89
	atom	39	0	THR	5	34. 049	0. 146	-10. 159	1. 00 21. 07
	atom	40	N	TRP	6	33. 168	-1. 803	-10. 811	1. 00 17. 19
	atom	41	CA	TRP	6	34. 469	-2. 441	-10. 892	1. 00 15. 52
	atom	42	CB	TRP	6	34. 434	-3. 740	-10. 096	1. 00 13. 26
2 0	atom	43	CG	TRP	6	33. 924	-3. 575	-8. 682	1. 00 14. 65
	atom	44	CD2	TRP	6	34. 619	-2. 966	-7. 586	1. 00 7. 71
	atom	45	CE2	TRP	6	33. 795	-3. 085	-6. 448	1. 00 13. 81
	atom	46	CE3	TRP	6	35. 860	-2. 328	-7. 459	1. 00 12. 05
	atom	47	CD1	TRP	6	32. 734	-4. 026	-8. 178	1. 00 14. 49
25	atom	48	NE1	TRP	6	32. 653	-3. 737	-6. 831	1. 00 18. 73
	atom	49	CZ2	TRP	6	34. 171	-2. 597	−5. 202	1. 00 14. 72
	atom	50	CZ3	TRP	6	36. 238	-1. 839	-6. 220	1. 00 13. 25
	atom	51	CH2	TRP	6	35. 392	-1. 976	−5 . 105	1. 00 15. 70
	atom	52	C	TRP	6	34. 900	-2. 736	-12. 330	1. 00 17. 14
3 0	atom	53	0	TRP	6	34. 073	-3. 074	-13. 171	1. 00 12. 10
	atom	54	N	THR	7	36. 190	-2. 577	-12. 616	1. 00 19. 22
	atom	55	CA	THR	7	36. 697	-2. 923	-13. 936	1. 00 19. 75
	atom	56	CB	THR	7	38. 062	-2. 269	-14. 251	1. 00 18. 95
	atom	57	0G1	THR	7	39. 045	-2. 708	-13. 301	1. 00 11. 09
3 5	atom	58	CG2	THR	7	37. 945	-0. 729	-14. 230	1. 00 7. 76
	atom	59	C	THR	7	36. 890	-4. 426	-13. 763	1. 00 27. 76

	atom	60	0	THR	7	35. 956 -5. 142 -13. 383 1. 00 30. 65	!
	atom	61	N	GLY	8	38. 092 -4. 919 -14. 005 1. 00 32. 30)
	atom	62	CA	GLY	8	38. 318 -6. 348 -13. 830 1. 00 30. 63)
	atom	63	С	GLY	8	39. 469 -6. 601 -12. 880 1. 00 25. 34	,
5	atom	64	0	GLY	8	39. 624 -7. 688 -12. 327 1. 00 26. 59)
	atom	65	N	ALA	9	40. 259 -5. 555 -12. 692 1. 00 18. 42	
	atom	66	CA	ALA	9	41. 429 -5. 567 -11. 852 1. 00 20. 57	,
	atom	67	СВ	ALA	9	41. 998 -4. 159 -11. 757 1. 00 21. 71	
	atom	68	С	ALA	9	41. 237 -6. 140 -10. 454 1. 00 25. 44	,
10	atom	69	0	ALA	9	40. 258 -5. 864 -9. 739 1. 00 28. 28	}
	atom	70	N	LEU	10	42. 212 -6. 942 -10. 074 1. 00 23. 65	;
	atom	71	CA	LEU	10	42. 230 -7. 567 -8. 784 1. 00 24. 29)
	atom	72	CB	LEU	10	43. 171 -8. 770 -8. 827 1. 00 23. 79)
	atom	73	CG	LEU	10	42. 615 -10. 071 -9. 422 1. 00 21. 37	,
15	atom	74	CD1	LEU	10	42. 033 -10. 895 -8. 285 1. 00 22. 12	<u>'</u>
	atom	75	CD2	LEU	10	41. 549 -9. 790 -10. 488 1. 00 20. 05	í
	atom	76	C	LEU	10	42. 778 -6. 525 -7. 840 1. 00 26. 02)
	atom	77	0	LEU	10	43. 620 -5. 716 -8. 243 1. 00 26. 63	}
	atom	78	N	ILE	11	42. 290 -6. 503 -6. 601 1. 00 26. 01	
2 0	atom	79	CA	ILE	11	42. 839 -5. 557 -5. 647 1. 00 24. 74	ŀ
	atom	80	CB	ILE	11	41. 995 -5. 462 -4. 382 1. 00 25. 59	}
	atom	81	CG2	ILE	11	42. 515 -4. 345 -3. 515 1. 00 26. 49	}
	atom	82	CG1	ILE	11	40. 528 -5. 217 -4. 745 1. 00 30. 67	,
	atom	83	CD1	ILE	11	40. 185 -3. 786 -4. 986 1. 00 26. 57	,
25	atom	84	С	ILE	11	44. 172 -6. 226 -5. 341 1. 00 23. 05)
	atom	85	0	ILE	11	44. 216 -7. 424 -5. 107 1, 00 21. 67	7
	atom	86	N	THR	12	45. 262 -5. 475 -5. 368 1. 00 24. 58	}
	atom	87	CA	THR	12	46. 565 -6. 085 -5. 145 1. 00 25. 76	
	atom	88	CB	THR	12	47. 490 -5. 739 -6. 291 1. 00 22. 73	
3 0	atom	89	0G1	THR	12	47. 462 -4. 324 -6. 502 1. 00 22. 66	
	atom	90	CG2	THR	12	47. 039 -6. 450 -7. 548 1. 00 19. 62	
	atom	91	C	THR	12	47. 300 -5. 754 -3. 857 1. 00 26. 55	
	atom	92	0	THR	12	47. 194 -4. 652 -3. 335 1. 00 27. 29	
	atom	93	N	PRO	13	48. 059 -6. 726 -3. 330 1. 00 31. 02	
3 5	atom	94	CD	PRO	13	48. 217 -8. 089 -3. 879 1. 00 32. 32	
	atom	95	CA	PRO	13	48. 829 -6. 543 -2. 096 1. 00 30. 95	5

	atom	96	СВ	PR0	13	49. 042 -7. 965	-1. 601	1. 00 27. 26
	atom	97	CG	PRO	13	49. 111 -8. 774	-2. 864	1. 00 31. 67
	atom	98	C	PRO	13	50. 152 -5. 855	-2. 417	1. 00 34. 84
	atom	99	0	PRO	13	50. 739 -6. 101	-3. 471	1. 00 29. 50
E	atom	100	N	CYS	14	50. 613 -4. 986	-1. 520	1. 00 23. 30
5	atom	101	CA	CYS	14	51. 891 -4. 302	-1. 727	1. 00 33. 33
		102	CB	CYS	14	51. 794 -2. 816	-1. 347	1. 00 44. 03
	atom	102	SG	CYS	14	50. 790 -2. 471	0. 117	1. 00 44. 03
	atom					52. 956 -4. 973	-0. 868	1. 00 44. 38
	atom	104	C	CYS	14		-1. 220	1. 00 44. 36
10	atom	105	0 N	CYS	14			
	atom	106	N	ALA	15	52. 518 -5. 514	0. 264	1. 00 45. 12 1. 00 44. 03
	atom	107	CA	ALA	15 15	53. 422 -6. 178	1. 198	
	atom	108	CB	ALA	15 15	53. 231 -5. 608	2. 608	1. 00 40. 66
	atom	109	C	ALA	15	53. 183 -7. 677	1. 216	1. 00 42. 16
15	atom	110	0	ALA	15	52. 165 -8. 170	0. 713	1. 00 40. 93
	atom	111	N	ALA	16	54. 144 -8. 410	1. 765	1. 00 36. 85
	atom	112	CA	ALA	16	53. 971 -9. 837	1. 884	1. 00 32. 86
	atom	113	CB	ALA	16	55. 234 -10. 469	2. 415	1. 00 26. 99
	atom	114	C	ALA	16	52. 868 -9. 874	2. 934	1. 00 33. 29
2 0	atom	115	0	ALA	16	52. 869 -9. 064	3. 862	1. 00 37. 11
	atom	116	N	GLU	17	51. 898 -10. 760	2. 785	1. 00 32. 39
	atom	117	CA	GLU	17	50. 851 -10. 833	3. 789	1. 00 26. 32
	atom	118	СВ	GLU	17	49. 513 -10. 306	3. 265	1. 00 30. 86
	atom	119	CG	GLU	17	49. 528 -9. 677	1. 895	1. 00 29. 77
25	atom	120	CD	GLU	17	48. 157 -9. 707	1. 254	1. 00 33. 50
	atom	121		GLU	17	47. 415 -8. 711	1. 424	1. 00 32. 53
	atom	122		GLU	17	47. 819 -10. 723	0. 595	1. 00 32. 84
	atom	123	С	GLU	17	50. 679 -12. 255	4. 276	1. 00 24. 51
	atom	124	0	GLU	17	50. 514 -13. 188	3. 485	1. 00 16. 59
3 0	atom	125	N	GLU	18	50. 739 -12. 385	5. 600	1. 00 26. 82
	atom	126	CA	GLU	18	50. 604 -13. 643	6. 320	1. 00 27. 85
	atom	127	CB	GLU	18	51. 444 -13. 571	7. 589	1. 00 34. 84
	atom	128	CG	GLU	18	52. 921 <i>-</i> 13. 830	7. 394	1. 00 42. 40
	atom	129	CD	GLU	18	53. 516 -14. 582	8. 566	1. 00 45. 99
3 5	atom	130	0E1	GLU	18	54. 476 <i>-</i> 14. 061	9. 171	1. 00 45. 15
	atom	131	0E2	GLU	18	53. 013 -15. 692	8. 880	1. 00 44. 59

			_					4 00 00 04
	atom	132	С	GLU	18	49. 151 -13. 868	6. 708	1. 00 29. 21
	atom	133	0	GLU	18	48. 451 -12. 931	7. 085	1. 00 28. 56
	atom	134	N	SER	19	48. 694 -15. 111	6. 668	1. 00 31. 66
	atom	135	CA	SER	19	47. 304 -15. 374	7. 022	1. 00 33. 52
5	atom	136	CB	SER	19	46. 517 -15. 684	5. 751	1. 00 31. 74
	atom	137	0G	SER	19	47. 196 -16. 652	4. 981	1. 00 28. 18
	atom	138	C	SER	19	47. 120 -16. 510	8. 036	1. 00 36. 81
	atom	139	0	SER	19	46. 005 -16. 787	8. 491	1. 00 37. 53
	atom	140	N	LYS	20	48. 215 -17. 175	8. 379	1. 00 37. 96
10	atom	141	CA	LYS	20	48. 176 -18. 280	9. 330	1. 00 34. 72
	atom	142	CB	LYS	20	48. 764 -19. 534	8. 677	1. 00 34. 98
	atom	143	CG	LYS	20	47. 728 -20. 526	8. 181	1. 00 37. 63
	atom	144	CD	LYS	20	48. 233 -21. 968	8. 303	1. 00 45. 68
	atom	145	CE	LYS	20	49. 654 -22. 140	7. 741	1. 00 50. 03
15	atom	146	NZ	LYS	20	49. 751 -23. 135	6. 616	1. 00 51. 95
	atom	147	С	LYS	20	49. 004 -17. 877	10. 550	1. 00 34. 35
	atom	148	0	LYS	20	50. 126 -17. 384	10. 398	1. 00 34. 45
	atom	149	N	LEU	21	48. 463 -18. 070	11. 751	1. 00 33. 05
	atom	150	CA	LEU	21	49. 199 -17. 693	12. 962	1. 00 32. 36
20	atom	151	СВ	LEU	21	48. 537 -18. 280	14. 226	1. 00 35. 12
	atom	152	CG	LEU	21	49. 026 -17. 899	15. 644	1. 00 28. 57
	atom	153	CD1	LEU	21	50. 301 -17. 098	15. 601	1. 00 29. 37
	atom	154	CD2	LEU	21	47. 943 -17. 094	16. 349	1. 00 27. 17
	atom	155	C	LEU	21	50. 638 -18. 181	12. 883	1. 00 29. 79
25	atom	156	0	LEU	21	50. 882 -19. 388	12. 784	1. 00 26. 13
	atom	157	N	PR0	22	51. 600 -17. 237	12. 889	1. 00 30. 54
	atom	158	CD	PRO	22	51. 282 -15. 800	12. 861	1. 00 31. 66
	atom	159	CA	PR0	22	53. 052 -17. 454	12. 832	1. 00 32. 01
	atom	160	CB	PR0	22	53. 629 -16. 041	12. 738	1. 00 33. 70
3 0	atom	161	CG	PR0	22	52. 499 -15. 210	12. 205	1. 00 30. 75
	atom	162	С	PR0	22	53. 593 -18. 209	14. 041	1. 00 35. 09
	atom	163	0	PR0	22	54. 678 -17. 897	14. 540	1. 00 39. 45
	atom	164	N	ILE	23	52. 802 -19. 184	14. 496	1. 00 33. 92
	atom	165	CA	ILE	23	53. 081 -20. 079	15. 616	1. 00 29. 63
3 5	atom	166	СВ	ILE	23	52. 899 -21. 539	15. 135	1. 00 32. 30
	atom	167	CG2	ILE	23	54. 222 -22. 295	15. 156	1. 00 33. 90

	atom	168	CG1	ILE	23	51	1. 8	335	-22	. 229	15.	979	1.	00	31.	35
	atom	169	CD1	ILE	23	51	1. 8	395	-23	. 740	15.	884	1.	00	35.	04
	atom	170	С	ILE	23	54	4. 4	440	-19	. 889	16.	298	1.	00	32 .	72
	atom	171	0	ILE	23	55	5. {	500	-20	. 012	15.	682	1.	00	29.	52
5	atom	172	N	ASN	24	54	4. 3	393	-19	. 605	17.	595	1.	00	37.	99
	atom	173	CA	ASN	24	55	5. (606	-19	. 343	18.	359	1.	00	39.	02
	atom	174	СВ	ASN	24	55	5. 8	800	-17	. 845	18.	534	1.	00	37.	86
	atom	175	CG	ASN	24	57	7. 2	203	-17	. 430	18.	268	1.	00	41.	03
	atom	176	0D1	ASN	24	58	3. (004	-18	. 220	17.	745	1.	00	37.	66
10	atom	177	ND2	ASN	24	57	7.	532	-16	. 187	18.	620	1.	00	38.	75
	atom	178	С	ASN	24	55	5. (628	-19	. 937	19.	735	1.	00	39.	37
	atom	179	0	ASN	24	54	4. !	584	-20	. 238	20.	304	1.	00	41.	52
	atom	180	N	ALA	25	56	3 . 8	838	-20	. 069	20.	273	1.	00	39 .	67
	atom	181	CA	ALA	25	57	7. (032	-20	. 577	21.	622	1.	00	37.	68
15	atom	182	CB	ALA	25	58	3. 4	497	-20	. 452	22.	028	1.	00	42.	61
	atom	183	C	ALA	25	56	ô. '	180	-19	. 693	22.	506	1.	00	33.	96
	atom	184	0	ALA	25	5	5. 3	320	-20	. 172	23.	241	1.	00	35.	81
	atom	185	N	LEU	26	56	ô. 4	426	-18	3. 394	22.	410	1.	00	30.	24
	atom	186	CA	LEU	26	5	5. (694	-17	405	23.	185	1.	00	29.	54
2 0	atom	187	CB	LEU	26	56	6. 2	256	-16	. 005	22.	926	1.	00	26.	07
	atom	188	CG	LEU	26	57	7. (616	-15	608	23.	523	1.	00	25.	12
	atom	189	CD1	LEU	26	5	7. 4	466	-14	l. 286	24.	238	1.	00	26.	71
	atom	190	CD2	LEU	26	58	B . 1	140	-16	6. 676	24.	475	1.	00	25.	70
	atom	191	C	LEU	26	54	4. 1	216	-17	'. 412	22 .	854	1.	00	32.	07
25	atom	192	0	LEU	26	53	3. (381	-17	. 282	23.	747	1.	00	39.	46
	atom	193	N	SER	27	53	3. 8	886	-17	. 573	21.	576	1.	00	33.	97
	atom	194	CA	SER	27	5	2. 4	490	-17	. 565	21.	148	1.	00	34.	97
	atom	195	CB	SER	27	5	2. 4	411	-17	. 627	19.	619	1.	00	38.	54
	atom	196	0G	SER	27	5	1.	508	-18	3. 642	19.	187	1.	00	42.	65
3 0	atom	197	С	SER	27	5	1.	726	-18	3. 735	21.	752	1.	00	36.	47
	atom	198	0 .	SER	27	50	0.	501	-18	3. 707	21.	868	1.	00	34.	83
	atom	199	N	ASN	28	5	2. 4	460	-19	764	22.	150	1.	00	37.	51
	atom	200	CA	ASN	28	5	1. 3	835	-20). 944	22.	713	1.	00	38.	99
	atom	201	CB	ASN	28	5	2. 1	682	-22	2. 177	22.	421	1.	00	46.	35
3 5	atom	202	CG	ASN	28	5	1. 3	850	-23	3. 328	21.	928	1.	00	51.	03
	atom	203	0D1	ASN	28	5	0. '	703	-23	3. 134	21.	530	1.	00	53 .	49

	atom	204	ND2	ASN	28	52. 409 -24. 535	21. 956	1. 00 55. 66
	atom	205	C	ASN	28	51. 639 -20. 788	24. 201	1. 00 37. 33
	atom	206	0	ASN	28	50. 889 -21. 533	24. 834	1. 00 31. 98
	atom	207	N	SER	29	52. 333 -19. 818	24. 771	1. 00 37. 14
5	atom	208	CA	SER	29	52. 176 <i>-</i> 19. 579	26. 188	1. 00 35. 88
	atom	209	CB	SER	29	53. 123 -18. 461	26. 638	1. 00 33. 82
	atom	210	0G	SER	29	52. 498 -17. 580	27. 564	1. 00 34. 09
	atom	211	С	SER	29	50. 712 -19. 158	26. 376	1. 00 33. 85
	atom	212	0	SER	29	50. 021 -19. 629	27. 282	1. 00 36. 33
10	atom	213	N	LEU	30	50. 239 -18. 319	25. 460	1. 00 28. 11
	atom	214	CA	LEU	30	48. 890 -17. 763	25. 505	1. 00 23. 92
	atom	215	CB	LEU	30	48. 927 -16. 376	24. 859	1. 00 14. 38
	atom	216	CG	LEU	30	47. 593 -15. 690	24. 700	1. 00 11. 04
	atom	217	CD1	LEU	30	46. 961 -15. 499	26. 069	1. 00 12. 59
15	atom	218	CD2	LEU	30	47. 795 -14. 352	23. 974	1. 00 13. 47
	atom	219	C	LEU	30	47. 731 -18. 557	24. 900	1. 00 24. 67
	atom	220	0	LEU	30	46. 758 -18. 876	25. 586	1. 00 20. 27
	atom	221	N	LEU	31	47. 830 -18. 840	23. 604	1. 00 25. 98
	atom	222	CA	LEU	31	46. 793 -19. 557	22. 864	1. 00 26. 72
2 0	atom	223	CB	LEU	31	46. 387 -18. 738	21. 643	1. 00 28. 09
	atom	224	CG	LEU	31	44. 953 -18. 895	21. 141	1. 00 31. 75
	atom	225	CD1	LEU	31	44. 349 -17. 513	20. 889	1. 00 31. 47
	atom	226	CD2	LEU	31	44. 944 -19. 712	19. 870	1. 00 30. 70
	atom	227	C	LEU	31	47. 341 -20. 886	22. 406	1. 00 27. 45
2 5	atom	228	0 .	LEU	31	48. 538 -21. 007	22. 198	1. 00 37. 06
	atom	229	N	ARG	32	46. 485 -21. 880	22. 222	1. 00 27. 60
	atom	230	CA	ARG	32	46. 963 -23. 188	21. 796	1. 00 31. 35
	atom	231	CB	ARG	32	46. 750 -24. 208	22. 917	1. 00 33. 85
	atom	232	CG	ARG	32	46. 668 -25. 659	22. 465	1. 00 44. 85
3 0	atom	233	CD	ARG	32	46. 596 -26. 609	23. 663	1. 00 51. 74
	atom	234	NE	ARG	32	47. 614 -26. 290	24. 667	1. 00 56. 45
	atom	235	CZ	ARG	32	48. 617 -27. 098	25. 014	1. 00 59. 99
	atom	236	NH1	ARG	32	48. 751 -28. 290	24. 443	1. 00 60. 21
	atom	237	NH2	ARG	32	49. 498 -26. 711	25. 932	1. 00 61. 46
3 5	atom	238	C	ARG	32	46. 330 -23. 700	20. 502	1. 00 33. 99
	atom	239	0	ARG	32	46. 925 -24. 524	19. 809	1. 00 38. 04

	atom	240	N	HIS	33	45	139	-23	. 213	20. 173	1. 00	30. 07
	atom	241	CA	HIS	33	44.	442	-23	6. 641	18. 967	1. 00	29. 00
	atom	242	СВ	HIS	33	42	953	-23	. 794	19. 268	1. 00	23. 73
	atom	243	CG	HIS	33	42	637	-24	. 892	20. 233	1. 00	27. 12
5	atom	244	CD2	HIS	33	43	436	-25	. 784	20. 868	1. 00	25. 66
	atom	245	ND1	HIS	33	41	346	-25	i. 199	20. 613	1. 00	22. 82
	atom	246	CE1	HIS	33	41.	365	-26	. 233	21. 434	1. 00	23. 60
	atom	247	NE2	HIS	33	42	621	-26	6. 608	21. 604	1. 00	24. 43
	atom	248	C	HIS	33	44	637	-22	. 637	17. 821	1. 00	34. 47
10	atom	249	0	HIS	33	43	676	-22	2. 232	17. 172	1. 00	35. 26
	atom	250	N	HIS	34	45	. 886	-22	2. 255	17. 572	1. 00	37. 29
	atom	251	CA	HIS	34	46	250	-21	. 284	16. 533	1. 00	40. 45
	atom	252	CB	HIS	34	47	. 761	-21	. 260	16. 385	1. 00	43. 17
	atom	253	CG	HIS	34	48	. 333	-22	. 600	16. 057	1. 00	48. 92
15	atom	254	CD2	HIS	34	48	. 895	-23	. 078	14. 922	1. 00	49. 02
	atom	255	ND1	HIS	34	48	. 309	-23	654	16. 945	1. 00	53. 07
	atom	256	CE1	HIS	34	48	. 830	-24	. 724	16. 373	1. 00	50. 31
	atom	257	NE2	HIS	34	49	. 194	-24	l. 399	15. 145	1. 00	53. 13
	atom	258	C	HIS	34	45	. 649	-21	. 494	15. 141	1. 00	40. 69
2 0	atom	259	0	HIS	34	45	. 682	-20). 591	14. 310	1. 00	42. 64
	atom	260	N	ASN	35	45	. 130	-22	2. 681	14. 866	1. 00	40. 62
	atom	261	CA	ASN	35	44	. 558	-22	2. 921	13. 556	1. 00	41. 61
	atom	262	CB	ASN	35	44	. 420	-24	l. 420	13. 298	1. 00	39. 60
	atom	263	CG	ASN	35	45	. 736	-25	5. 055	12. 878	1. 00	42. 24
25	atom	264	0D1	ASN	35	46	. 077	-26	5. 152	13. 323	1. 00	45. 01
	atom	265	ND2	ASN	35	46	. 488	-24	1. 362	12. 024	1. 00	39. 61
	atom	266	С	ASN	35	43	. 217	-22	2. 224	13. 382	1. 00	41. 88
	atom	267	0	ASN	35	42	. 741	-22	2. 079	12. 261	1. 00	48. 58
	atom	268	N	MET	36	42	. 617	-21	. 790	14. 487	1. 00	39. 02
3 0	atom	269	CA	MET	36	41	. 331	-21	. 085	14. 466	1. 00	34. 47
	atom	270	CB	MET	36	40	. 600	-2 1	. 250	15. 789	1. 00	38. 00
	atom	271	CG	MET	36	40	. 788	-22	2. 577	16. 439	1. 00	38. 32
	atom	272	SD	MET	36				3. 491	16. 413		43. 98
	atom	273	CE	MET	36	38	. 050	-22	2. 269	15. 969		37. 20
3 5	atom	274	C	MET	36	41	. 542	-19	9. 599	14. 266		33. 18
	atom	275	0	MET	36	40	. 592	-18	3. 848	14. 059	1. 00	33. 83

	0 t 0 m	276	N	VAL	37	42. 795 -19. 180	14. 357	1. 00 28. 33
	atom			VAL	37	43. 134 -17. 785	14. 222	1. 00 20. 03
	atom	277	CA		37	44. 152 -17. 391	15. 307	1. 00 30. 04
	atom	278	CB CC1	VAL				1. 00 30. 43
_	atom	279	CG1	VAL	37	44. 675 -15. 980	15. 061	
5	atom	280	CG2		37	43. 487 -17. 485	16. 676	1. 00 27. 52
	atom	281	C	VAL	37	43. 686 -17. 529	12. 834	1. 00 32. 08
	atom	282	0	VAL	37	44. 552 -18. 254	12. 351	1. 00 34. 38
	atom	283	N	TYR	38	43. 171 -16. 498	12. 182	1. 00 33. 37
	atom	284	CA	TYR	38	43. 610 -16. 178	10. 831	1. 00 32. 41
10	atom	285	CB	TYR	38	42. 694 -16. 839	9. 805	1. 00 31. 04
	atom	286	CG	TYR	38	41. 321 -16. 218	9. 757	1. 00 28. 60
	atom	287	CD1	TYR	38	41. 058 -15. 127	8. 934	1. 00 28. 40
	atom	288	CE1	TYR	38	39. 777 -14. 582	8. 838	1. 00 27. 52
	atom	289	CD2	TYR	38	40. 272 -16. 746	10. 498	1. 00 27. 69
15	atom	290	CE2	TYR	38	38. 988 -16. 207	10. 408	1. 00 26. 54
	atom	291	CZ	TYR	38	38. 753 -15. 129	9. 574	1. 00 28. 08
	atom	292	OH	TYR	38	37. 487 -14. 617	9. 456	1. 00 33. 47
	atom	293	C	TYR	38	43. 611 -14. 691	10. 571	1. 00 30. 86
	atom	294	0	TYR	38	43. 168 -13. 895	11. 404	1. 00 29. 91
20	atom	295	N	ALA	39	44. 085 -14. 331	9. 384	1. 00 26. 58
	atom	296	CA	ALA	39	44. 150 -12. 939	8. 993	1. 00 26. 36
	atom	297	СВ	ALA	39	45. 583 -12. 441	9. 077	1. 00 21. 23
	atom	298	С	ALA	39	43. 596 -12. 759	7. 582	1. 00 30. 17
	atom	299	0	ALA	39	43. 787 -13. 615	6. 708	1. 00 29. 35
25	atom	300	N	THR	40	42. 886 -11. 651	7. 384	1. 00 30. 81
	atom	301	CA	THR	40	42. 303 -11. 328	6. 101	1. 00 31. 04
	atom	302	СВ	THR	40	41. 198 -10. 268	6. 229	1. 00 30. 42
	atom	303	0G1	THR	40	41. 743 -9. 070	6. 790	1. 00 29. 82
	atom	304	CG2	THR	40	40. 065 -10. 778	7. 099	1. 00 20. 31
3 0	atom	305	С	THR	40	43. 402 -10. 782	5. 201	1. 00 33. 39
	atom	306	0	THR	40	44. 283 -10. 055	5. 659	1. 00 36. 59
	atom	307	N	THR	41	43. 330 -11. 144	3. 923	1. 00 33. 19
	atom	308	CA	THR	41	44. 296 -10. 735	2. 915	1. 00 31. 53
	atom	309	СВ	THR	41	45. 318 -11. 858	2. 642	1. 00 34. 00
3 5	atom	310	0G1	THR	41	44. 629 -13. 042	2. 214	1. 00 33. 52
	atom	311		THR	41	46. 105 -12. 178	3. 904	1. 00 37. 37
	a com	011	Our	11111	7 1	10. 100 12. 110	0. 00 1	

		240	^	TUD	44	40 506 10 400	1 500	1. 00 32. 18
	atom	312	C	THR	41	43. 586 -10. 420		
	atom	313	0	THR	41	42. 34510. 474		1. 00 28. 34
	atom	314	N	SER	42	44. 395 -10. 097		1. 00 30. 60
	atom	315	CA	SER	42	43. 950 -9. 755		1. 00 28. 87
5	atom	316	СВ	SER	42	45. 160 -9. 587		1. 00 30. 94
	atom	317	0G	SER	42	45. 386 -8. 232		1. 00 41. 09
	atom	318	С	SER	42	43. 078 -10. 838		1. 00 25. 21
	atom	319	0	SER	42	41. 975 -10. 598		1. 00 21. 53
	atom	320	N	ARG	43	43. 598 -12. 049	-1. 366	1. 00 25. 12
10	atom	321	CA	ARG	43	42. 898 -13. 187	-1. 922	1. 00 24. 36
	atom	322	CB	ARG	43	43. 474 -14. 464	-1. 307	1. 00 22. 07
	atom	323	CG	ARG	43	44. 756 -14. 920	-1. 980	1. 00 35. 37
	atom	324	CD	ARG	43	45. 876 <i>-</i> 15. 237	-0. 980	1. 00 43. 28
	atom	325	NE	ARG	43	46. 643 -16. 436	-1. 347	1. 00 45. 15
15	atom	326	CZ	ARG	43	47. 970 -16. 484	-1. 484	1. 00 47. 79
	atom	327	NH1	ARG	43	48. 717 -15. 403	-1. 289	1. 00 48. 79
	atom	328	NH2	ARG	43	48. 557 -17. 623	-1. 826	1. 00 49. 62
	atom	329	С	ARG	43	41. 372 -13. 147	-1. 756	1. 00 21. 27
	atom	330	0	ARG	43	40. 642 -13. 709	-2. 575	1. 00 21. 29
20	atom	331	N	SER	44	40. 892 -12. 478	-0. 707	1. 00 21. 05
	atom	332	CA	SER	44	39. 455 -12. 409	-0. 431	1. 00 17. 85
	atom	333	CB	SER	44	39. 181 -12. 682	1. 068	1. 00 18. 70
	atom	334	0G	SER	44	39. 495 -11. 568	1. 885	1. 00 24. 38
	atom	335	С	SER	44	38. 798 -11. 105	-0. 868	1. 00 9. 35
25	atom	336	0	SER	44	37. 582 -11. 024	-0. 926	1. 00 8. 69
	atom	337	N	ALA	45	39. 612 -10. 101	-1. 170	1. 00 6. 77
	atom	338	CA	ALA	45	39. 136 -8. 794	-1. 635	1. 00 12. 00
	atom	339	CB	ALA	45	40. 271 -8. 062	-2. 347	1. 00 10. 65
	atom	340	С	ALA	45	37. 948 -8. 906	-2. 595	1. 00 16. 23
3 0	atom	341	0	ALA	45	37. 045 -8. 069	-2. 600	1. 00 24. 10
	atom	342	N	GLY	46	37. 978 -9. 928	-3. 437	1. 00 19. 30
	atom	343	CA	GLY	46	36. 913 -10. 115	-4. 391	1. 00 19. 54
	atom	344	C	GLY	46	35. 587 -10. 419	-3. 738	1. 00 20. 90
	atom	345	0	GLY	46	34. 567 -9. 860	-4. 135	1. 00 23. 71
3 5	atom	346	N	LEU	47	35. 592 -11. 319	-2. 755	1. 00 22. 91
	atom	347	CA	LEU	47	34. 369 -11. 688	-2. 058	1. 00 19. 97

	atom	348	СВ	LEU	47	34. 678	-12. 655	-0. 931	1. 00 23. 98
	atom	349	CG	LEU	47	34. 891	-14. 108	-1. 336	1. 00 27. 07
	atom	350	CD1	LEU	47	36. 076	-14. 203	-2. 281	1. 00 26. 74
	atom	351	CD2	LEU	47	35. 114	-14. 946	-0. 092	1. 00 23. 16
5	atom	352	С	LEU	47	33. 739	-10. 428	-1. 484	1. 00 22. 24
	atom	353	0	LEU	47	32. 527	-10. 206	-1. 604	1. 00 25. 16
	atom	354	N	ARG	48	34. 577	-9. 589	-0. 888	1. 00 17. 98
	atom	355	CA	ARG	48	34. 102	2 -8. 359	-0. 289	1. 00 19. 39
	atom	356	CB	ARG	48	35. 257	7. 600	0. 361	1. 00 22. 15
10	atom	357	CG	ARG	48	34. 848	3 -6. 275	0. 991	1. 00 25. 34
	atom	358	CD	ARG	48	33. 665	6. 451	1. 924	1. 00 31. 73
	atom	359	NE	ARG	48	33. 968	3 -7. 332	3. 052	1. 00 41. 05
	atom	360	CZ	ARG	48	33. 971	-6. 954	4. 332	1. 00 44. 95
	atom	361	NH1	ARG	48	33. 684	-5. 697	4. 672	1. 00 44. 28
15	atom	362	NH2	ARG	48	34. 265	5 −7. 840	5. 279	1. 00 45. 69
	atom	363	C	ARG	48	33. 426	6 −7. 448	-1. 280	1. 00 18. 00
	atom	364	0	ARG	48	32. 389	-6. 861	-0. 978	1. 00 13. 22
	atom	365	N	GLN	49	34. 033	3 -7. 336	-2. 459	1. 00 19. 75
	atom	366	CA	GLN	49	33. 551	-6. 474	-3. 531	1. 00 17. 34
20	atom	367	CB	GLN	49	34. 394	4 -6. 691	-4. 778	1. 00 23. 31
	atom	368	CG	GLN	49	35. 392	2 -5. 599	-5. 057	1. 00 25. 70
	atom	369	CD	GLN	49	36. 457	7 -6. 046	-6. 035	1. 00 32. 79
	atom	370	0E1	GLN	49	36. 87	5 -5. 290	-6. 915	1. 00 32. 01
	atom	371	NE2	GLN	49	36. 903	3 -7. 287	-5. 887	1. 00 35. 96
25	atom	372	C	GLN	49	32. 097	7 -6. 705	-3. 869	1. 00 20. 93
	atom	373	0	GLN	49	31. 370	−5. 769	-4 . 200	1. 00 25. 69
	atom	374	N	LYS	50	31. 658	3 -7. 951	-3. 782	
	atom	375	CA	LYS	50	30. 27	6 -8. 271	-4. 084	1. 00 20. 89
	atom	376	CB	LYS	50		9 -9.775		
3 0	atom	377	CG	LYS	50		1 -10. 432		1. 00 25. 57
	atom	378	CD	LYS	50	31. 34	7 –10. 361		1. 00 28. 52
	atom	379	CE	LYS	50	32. 68	9 -9. 833		1. 00 33. 85
	atom	380	NZ	LYS	50		3 -8. 461		1. 00 29. 19
	atom	381	C	LYS	50	29. 28			1. 00 20. 77
3 5	atom	382	0	LYS	50	28. 19	6 -7. 349		1. 00 20. 61
	atom	383	N	LYS	51	29. 66	7 -8. 052	-1. 753	1. 00 28. 30

	atom	384	CA	LYS	51	28. 786	-7. 733	-0. 627	1. 00 27. 64
	atom	385	СВ	LYS	51	29. 338	-8. 347	0. 666	1. 00 28. 63
	atom	386	CG	LYS	51	29. 772	-9. 809	0. 570	1. 00 34. 26
	atom	387	CD	LYS	51	31. 099	-10. 036	1. 324	1. 00 39. 78
5	atom	388	CE	LYS	51	30. 917	-10. 860	2. 597	1. 00 41. 29
_	atom	389	NZ	LYS	51	29. 487	-11. 221	2. 851	1. 00 42. 28
	atom	390	С	LYS	51	28. 637	-6. 239	-0. 440	1. 00 25. 06
	atom	391	0	LYS	51	27. 693	-5. 757	0. 189	1. 00 26. 11
	atom	392	N	VAL	52	29. 574	-5. 505	-1. 014	1. 00 23. 63
10	atom	393	CA	VAL	52	29. 605	-4. 063	-0. 869	1. 00 22. 61
	atom	394	СВ	VAL	52	31. 070	-3. 649	-0. 616	1. 00 19. 17
	atom	395	CG1	VAL	52	31. 729	-3. 212	-1. 894	1. 00 17. 90
	atom	396	CG2	VAL	52	31. 131	-2. 603	0. 428	1. 00 24. 32
	atom	397	С	VAL	52	29. 024	-3. 279	-2. 054	1. 00 19. 94
15	atom	398	0	VAL	52	28. 875	-2. 063	-1. 995	1. 00 19. 73
	atom	399	N	THR	53	28. 671	-3. 996	-3. 111	1. 00 20. 39
	atom	400	CA	THR	53	28. 170	-3. 397	-4. 339	1. 00 18. 89
	atom	401	СВ	THR	53	28. 843	-4. 061	-5. 557	1. 00 18. 51
	atom	402	0G1	THR	53	30. 258	-3. 831	-5. 506	1. 00 23. 13
2 0	atom	403	CG2	THR	53	28. 285	-3. 519	-6. 855	1. 00 15. 71
	atom	404	C	THR	53	26. 672	-3. 478	-4. 536	1. 00 21. 86
	atom	405	0	THR	53	26. 113	-4. 555	-4. 677	1. 00 22. 43
	atom	406	N	PHE	54	26. 015	-2. 330	-4. 585	1. 00 22. 23
	atom	407	CA	PHE	54	24. 577	-2. 329	-4. 806	1. 00 20. 95
25	atom	408	CB	PHE	54	23. 857	-2. 852	-3. 568	1. 00 17. 15
	atom	409	CG	PHE	54	24. 485	-2. 432	-2. 299	1. 00 15. 48
	atom	410	CD1	PHE	54	24. 290	-1. 156	-1. 804	1. 00 21. 00
	atom	411	CD2	PHE	54	25. 313	-3. 299	-1. 607	1. 00 28. 94
	atom	412	CE1	PHE	54	24. 914	-0. 738	-0. 628	1. 00 24. 14
3 0	atom	413	CE2	PHE	54	25. 949	-2. 898	-0. 428	1. 00 30. 32
	atom	414	CZ	PHE	54	25. 745	-1. 608	0. 059	1. 00 29. 70
	atom	415	C	PHE	54	24. 134	-0. 911	-5. 120	1. 00 21. 37
	atom	416	0	PHE	54	24. 959	0. 001	-5. 171	1. 00 21. 13
	atom	417	N	ASP	55	22. 833	-0. 738	-5. 319	1. 00 20. 70
3 5	atom	418	CA	ASP	55	22. 251	0. 557	-5. 628	1. 00 20. 89
	atom	419	CB	ASP	55	21. 155	0. 361	-6. 695	1. 00 19. 59

	atom	420	CG	ASP	55	20. 435	1. 663	-7. 079	1. 00 20. 07
	atom	421	0D1	ASP	55	21. 080	2. 589	-7. 622	1. 00 14. 28
	atom	422	0D2	ASP	55	19. 206	1. 743	-6. 835	1. 00 24. 20
	atom	423	С	ASP	55	21. 675	1. 253	-4. 372	1. 00 23. 84
5	atom	424	0	ASP	55	21. 070	0. 624	-3. 493	1. 00 26. 41
	atom	425	N	ARG	56	21. 871	2. 558	-4. 289	1. 00 17. 80
	atom	426	CA	ARG	56	21. 344	3. 297	-3. 177	1. 00 16. 51
	atom	427	CB	ARG	56	22. 467	4. 039	-2. 436	1. 00 16. 87
	atom	428	CG	ARG	56	23. 525	3. 130	-1. 871	1. 00 10. 07
10	atom	429	CD	ARG	56	24. 710	3. 082	-2. 808	1. 00 15. 13
	atom	430	NE	ARG	56	25. 652	4. 167	-2. 523	1. 00 17. 01
	atom	431	CZ	ARG	56	25. 953	5. 128	-3. 389	1. 00 28. 89
	atom	432	NH1	ARG	56	25. 388	5. 152	-4. 598	1. 00 27. 60
	atom	433	NH2	ARG	56	26. 838	6. 053	-3. 064	1. 00 31. 98
15	atom	434	С	ARG	56	20. 323	4. 297	-3. 659	1. 00 15. 89
	atom	435	0	ARG	56	20. 638	5. 136	-4. 477	1. 00 18. 04
	atom	436	N	LEU	57	19. 095	4. 190	-3. 152	1. 00 21. 41
	atom	437	CA	LEU	57	18. 010	5. 127	-3. 466	1. 00 19. 39
	atom	438	CB	LEU	57	16. 760	4. 398	-3. 960	1. 00 21. 90
20	atom	439	CG	LEU	57	16. 814	3. 732	-5. 333	1. 00 30. 04
	atom	440	CD1	LEU	57	15. 394	3. 306	-5. 717	1. 00 23. 84
	atom	441	CD2	LEU	57	17. 411	4. 701	-6. 382	1. 00 24. 33
	atom	442	С	LEU	57	17. 697	5. 801	−2. 125	1. 00 22. 57
	atom	443	0	LEU	57	17. 744	5. 154	-1. 063	1. 00 21. 40
25	atom	444	N	GLN	58	17. 360	7. 083	−2. 176	1. 00 20. 39
	atom	445	CA	GLN	58	17. 082	7. 850	-0. 983	1. 00 17. 61
	atom	446	CB	GLN	58	18. 271	8. 781	-0. 695	1. 00 19. 01
	atom	447	CG	GLN	58	19. 212	8. 352	0. 413	1. 00 18. 78
	atom	448	CD	GLN	58	20. 304	9. 377	0. 649	1. 00 19. 26
3 0	atom	449	0E1		58	20. 684	10. 114	-0. 265	1. 00 25. 14
	atom	450	NE2	GLN	58	20. 813	9. 436	1. 870	1. 00 7. 96
	atom	451	С	GLN	58	15. 836	8. 717	-1. 136	1. 00 18. 94
	atom	452	0	GLN	58	15. 714	9. 465	-2. 113	1. 00 18. 41
	atom	453	N	VAL	59	14. 928	8. 631	-0. 164	1. 00 15. 86
3 5	atom	454	CA	VAL	59	13. 726	9. 464	-0. 143	1. 00 13. 64
	atom	455	CB	VAL	59	12. 432	8. 635	-0. 050	1. 00 18. 32

	atom	456	CG1	VAL	59	11. 345	9. 308	-0. 842	1. 00 12. 43
	atom	457	CG2	VAL	59	12. 665	7. 228	-0. 560	1. 00 23. 22
	atom	458	C	VAL	59	13. 872	10. 308	1. 120	1. 00 11. 72
	atom	459	0	VAL	59	13. 692	9. 831	2. 226	1. 00 10. 53
5	atom	460	N	LEU	60	14. 231	11. 566	0. 947	1. 00 14. 06
	atom	461	CA	LEU	60	14. 457	12. 418	2. 090	1. 00 14. 87
	atom	462	CB	LEU	60	15. 545	13. 433	1. 767	1. 00 12. 50
	atom	463	CG	LEU	60	16. 894	12. 787	1. 394	1. 00 17. 55
	atom	464	CD1	LEU	60	17. 892	13. 910	1. 096	1. 00 11. 66
10	atom	465	CD2	LEU	60	17. 414	11. 848	2. 527	1. 00 2. 00
	atom	466	C	LEU	60	13. 206	13. 103	2. 595	1. 00 18. 51
	atom	467	0	LEU	60	12. 423	13. 669	1. 825	1. 00 16. 16
	atom	468	N	ASP	61	13. 067	13. 057	3. 917	1. 00 18. 47
	atom	469	CA	ASP	61	11. 933	13. 587	4. 656	1. 00 19. 17
15	atom	470	CB	ASP	61	11. 621	12. 612	5. 784	1. 00 26. 43
	atom	471	CG	ASP	61	10. 307	11. 985	5. 617	1. 00 34. 40
	atom	472	0D1	ASP	61	9. 719	12. 202	4. 530	1. 00 35. 57
	atom	473	0D2	ASP	61	9. 871	11. 295	6. 560	1. 00 37. 74
	atom	474	C	ASP	61	12. 000	14. 976	5. 287	1. 00 9. 45
2 0	atom	475	0	ASP	61	13. 036	15. 610	5. 330	1. 00 11. 81
	atom	476	N	ASP	62	10. 856	15. 400	5. 808	1. 00 8. 67
	atom	477	CA	ASP	62	10. 717	16. 659	6. 541	1. 00 13. 85
	atom	478	CB	ASP	62	9. 235	16. 962	6. 773	1. 00 19. 68
	atom	479	CG	ASP	62	8. 622	17. 785	5. 653	1. 00 24. 90
2 5	atom	480	0D1	ASP	62	9. 193	18. 828	5. 278	1. 00 29. 35
	atom	481	0D2	ASP	62	7. 557	17. 388	5. 146	1. 00 36. 92
	atom	482	C	ASP	62	11. 430	16. 417	7. 901	1. 00 11. 46
	atom	483	0	ASP	62	12. 156	17. 265	8. 419	1. 00 14. 07
	atom	484	N	HIS	63	11. 220	15. 234	8. 459	1. 00 6. 43
3 0	atom	485	CA	HIS	63	11. 879	14. 842	9. 683	1. 00 7. 74
	atom	486	CB	HIS	63	11. 485	13. 424	10. 038	1. 00 8. 47
	atom	487	CG	HIS	63	10. 112	13. 317	10. 598	1. 00 8. 99
	atom	488	CD2	HIS	63	9. 179	12. 339	10. 498	1. 00 8. 53
	atom	489	ND1	HIS	63	9. 564	14. 297	11. 399	1. 00 11. 03
3 5	atom	490	CE1	HIS	63	8. 352	13. 925	11. 772	1. 00 10. 35
	atom	491	NE2	HIS	63	8. 095	12. 741	11. 237	1. 00 12. 66

	atom	492	С	HIS	63	13. 383	14. 920	9. 472	1. 00 10. 38
	atom	493	0	HIS	63	14. 125	15. 294	10. 370	1. 00 16. 98
	atom	494	N	TYR	64	13. 830	14. 574	8. 269	1. 00 11. 90
	atom	495	CA	TYR	64	15. 246	14. 633	7. 927	1. 00 7. 03
5	atom	496	СВ	TYR	64	15. 477	13. 834	6. 642	1. 00 9. 53
	atom	497	CG	TYR	64	16. 891	13. 867	6. 083	1. 00 6. 78
	atom	498	CD1	TYR	64	17. 815	12. 885	6. 415	1. 00 5. 13
	atom	499	CE1	TYR	64	19. 105	12. 925	5. 916	1. 00 14. 54
	atom	500	CD2	TYR	64	17. 294	14. 884	5. 250	1. 00 2. 00
10	atom	501	CE2	TYR	64	18. 555	14. 937	4. 749	1. 00 2. 00
	atom	502	CZ	TYR	64	19. 475	13. 966	5. 077	1. 00 11. 69
	atom	503	ОН	TYR	64	20. 755	14. 046	4. 555	1. 00 11. 33
	atom	504	С	TYR	64	15. 742	16. 086	7. 755	1. 00 9. 99
	atom	505	0	TYR	64	16. 838	16. 414	8. 174	1. 00 10. 97
15	atom	506	N	ARG	65	14. 951	16. 958	7. 128	1. 00 12. 39
	atom	507	CA	ARG	65	15. 390	18. 341	6. 923	1. 00 11. 20
	atom	508	CB	ARG	65	14. 527	19. 033	5. 848	1. 00 12. 74
	atom	509	CG	ARG	65	14. 980	18. 796	4. 390	1. 00 17. 83
	atom	510	CD	ARG	65	13. 838	18. 997	3. 373	1. 00 11. 66
20	atom	511	NE	ARG	65	13. 515	17. 724	2. 745	1. 00 12. 38
	atom	512	CZ	ARG	65	12. 293	17. 229	2. 669	1. 00 12. 36
	atom	513	NH1	ARG	65	11. 272	17. 904	3. 181	1. 00 21. 59
	atom	514	NH2	ARG	65	12. 090	16. 048	2. 107	1. 00 22. 71
	atom	515	С	ARG	65	15. 327	19. 118	8. 230	1. 00 10. 20
2 5	atom	516	0	ARG	65	16. 164	19. 973	8. 494	1. 00 10. 28
	atom	517	N	ASP	66	14. 315		9. 040	1. 00 11. 92
	atom	518	CA	ASP	66	14. 143	19. 463	10. 344	1. 00 10. 53
	atom	519	CB	ASP	66	12. 920	18. 882	11. 050	1. 00 11. 57
	atom	520	CG	ASP	66	11. 601	19. 280	10. 379	1. 00 13. 23
3 0	atom	521	0D1		66	11. 562	20. 246	9. 586	1. 00 23. 22
	atom	522		ASP	66	10. 590	18. 617	10. 649	1. 00 18. 03
	atom	523	C	ASP	66	15. 375	19. 216	11. 196	1. 00 10. 59
	atom	524	0	ASP	66	15. 927	20. 137	11. 785	1. 00 17. 43
	atom	525	N	VAL	67	15. 805	17. 959	11. 254	1. 00 12. 05
3 5	atom	526	CA	VAL	67	16. 975	17. 582	12. 024	1. 00 14. 16
	atom	527	CB	VAL	67	17. 135	16. 050	12. 080	1. 00 14. 68

	atom	528	CG1	VAL	67	18. 492	15. 683	12. 680	1. 00 12. 91
	atom	529	CG2	VAL	67	16. 019	15. 452	12. 901	1. 00 15. 06
	atom	530	C	VAL	67	18. 231	18. 196	11. 439	1. 00 16. 75
	atom	531	0	VAL	67	19. 103	18. 650	12. 168	1. 00 20. 85
5	atom	532	N	LEU	68	18. 331	18. 205	10. 117	1. 00 19. 38
	atom	533	CA	LEU	68	19. 493	18. 788	9. 469	1. 00 17. 25
	atom	534	CB	LEU	68	19. 348	18. 689	7. 962	1. 00 16. 80
	atom	535	CG	LEU	68	20. 566	18. 561	7. 064	1. 00 13. 39
	atom	536	CD1	LEU	68	20. 257	19. 311	5. 814	1. 00 11. 90
10	atom	537	CD2	LEU	68	21. 824	19. 079	7. 713	1. 00 12. 32
	atom	538	C	LEU	68	19. 613	20. 246	9. 855	1. 00 18. 34
	atom	539	0	LEU	68	20. 681	20. 691	10. 259	1. 00 18. 28
	atom	540	N	LYS	69	18. 513	20. 991	9. 722	1. 00 18. 88
	atom	541	CA	LYS	69	18. 519	22. 421	10. 050	1. 00 21. 95
15	atom	542	CB	LYS	69	17. 152	23. 064	9. 750	1. 00 19. 48
	atom	543	CG	LYS	69	17. 056	24. 548	10. 085	1. 00 27. 21
	atom	544	CD	LYS	69	17. 951	25. 421	9. 167	1. 00 38. 86
	atom	545	CE	LYS	69	18. 436	26. 718	9. 847	1. 00 41. 07
	atom	546	NZ	LYS	69	19. 792	26. 593	10. 505	1. 00 38. 52
20	atom	547	C	LYS	69	18. 909	22. 668	11. 512	1. 00 21. 81
	atom	548	0	LYS	69	19. 668	23. 597	11. 806	1. 00 20. 33
	atom	549	N	GLU	70	18. 394	21. 852	12. 428	1. 00 19. 09
	atom	550	CA	GLU	70	18. 749	22. 029	13. 832	1. 00 15. 47
	atom	551	CB	GLU	70	17. 995	21. 016	14. 715	1. 00 17. 65
2 5	atom	552	CG	GLU	70	16. 613	21. 489	15. 235	1. 00 10. 96
	atom	553	CD	GLU	70	15. 720	20. 320	15. 683	1. 00 17. 00
	atom	554	0E1		70	14. 488	20. 351	15. 464	1. 00 16. 61
	atom	555		GLU	70	16. 254	19. 354	16. 259	1. 00 20. 20
	atom	556	C	GLU	70	20. 275	21. 840	13. 950	1. 00 14. 28
3 0	atom	557	0	GLU	70	20. 964	22. 612	14. 629	1. 00 11. 43
	atom	558	N	MET	71	20. 806	20. 842	13. 248	1. 00 11. 88
	atom	559	CA	MET	71	22. 244	20. 563	13. 289	1. 00 14. 32
	atom	560	CB	MET	71	22. 584	19. 235	12. 588	1. 00 14. 16
	atom	561	CG	MET	71	22. 224	17. 968	13. 368	1. 00 9. 37
3 5	atom	562	SD	MET	71	22. 245	16. 550	12. 260	1. 00 15. 49
	atom	563	CE	MET	71	23. 964	16. 104	12. 333	1. 00 8. 73

	atom	564	С	MET	71	23. 075	21. 669	12. 657	1. 00 15. 37
	atom	565	0	MET	71	24. 211	21. 893	13. 049	1. 00 21. 07
	atom	566	N	LYS	72	22. 530	22. 361	11. 669	1. 00 19. 18
	atom	567	CA	LYS	72	23. 305	23. 431	11. 037	1. 00 22. 11
5	atom	568	СВ	LYS	72	22. 665	23. 842	9. 696	1. 00 17. 90
	atom	569	CG	LYS	72	22. 668	22. 698	8. 663	1. 00 24. 56
•	atom	570	CD	LYS	72	22. 275	23. 141	7. 254	1. 00 20. 71
	atom	571	CE	LYS	72	22. 862	22. 187	6. 219	1. 00 28. 30
	atom	572	NZ	LYS	72	22. 248	22. 346	4. 857	1. 00 23. 88
10	atom	573	C	LYS	72	23. 380	24. 619	12. 001	1. 00 22. 65
	atom	574	0	LYS	72	24. 397	25. 302	12. 108	1. 00 21. 19
	atom	575	N	ALA	73	22. 302	24. 835	12. 739	1. 00 19. 95
	atom	576	CA	ALA	73	22. 279	25. 940	13. 667	1. 00 22. 76
	atom	577	CB	ALA	73	20. 881	26. 080	14. 257	1. 00 17. 61
15	atom	578	C	ALA	73	23. 327	25. 765	14. 770	1. 00 25. 80
	atom	579	0	ALA	73	23. 894	26. 740	15. 250	1. 00 27. 15
	atom	580	N	LYS	74	23. 584	24. 524	15. 174	1. 00 28. 16
	atom	581	CA	LYS	74	24. 567	24. 286	16. 216	1. 00 25. 53
	atom	582	CB	LYS	74	24. 415	22. 877	16. 808	1. 00 26. 08
2 0	atom	583	CG	LYS	74	23. 611	22. 800	18. 116	1. 00 29. 43
	atom	584	CD	LYS	74	24. 208	23. 672	19. 232	1. 00 31. 87
	atom	585	CE	LYS	74	24. 525	22. 850	20. 490	1. 00 36. 37
	atom	586	NZ	LYS	74	23. 999	23. 451	21. 763	1. 00 37. 56
	atom	587	C	LYS	74	25. 948	24. 434	15. 599	1. 00 27. 65
2 5	atom	588	0	LYS	74	26. 835	25. 098	16. 164	1. 00 28. 65
	atom	589	N	ALA	75	26. 127	23. 827		1. 00 22. 91
	atom	590	CA	ALA	75	27. 414	23. 873	13. 754	1. 00 20. 17
	atom	591	CB	ALA	75	27. 379	23. 020	12. 538	1. 00 21. 44
	atom	592	С	ALA	75	27. 834	25. 276	13. 371	1. 00 21. 91
3 0	atom	593	0	ALA	75	29. 024	25. 569	13. 279	1. 00 22. 39
	atom	594	N	SER	76	26. 847	26. 133	13. 144	1. 00 24. 75
	atom	595	CA	SER	76	27. 095	27. 505	12. 751	1. 00 26. 04
	atom	596	СВ	SER	76	25. 829	28. 114	12. 164	1. 00 27. 50
	atom	597	0G	SER	76	25. 166	28. 921	13. 119	1. 00 27. 03
3 5	atom	598	C	SER	76	27. 534	28. 277	13. 975	1. 00 29. 40
	atom	599	0	SER	76	27. 652	29. 502	13. 950	1. 00 30. 52

	atom	600	N	THR	77	27. 796	27. 534	15. 041	1. 00 29. 85
	atom	601	CA	THR	77	28. 225	28. 105	16. 304	1. 00 29. 93
	atom	602	СВ	THR	77	27. 400	27. 476	17. 436	1. 00 28. 64
	atom	603	0G1	THR	77	26. 580	28. 490	18. 021	1. 00 28. 24
5	atom	604		THR	77	28. 276	26. 812	18. 471	1. 00 22. 34
	atom	605	С	THR	77	29. 718	27. 836	16. 486	1. 00 29. 10
	atom	606	0	THR	77	30. 334	28. 257	17. 462	1. 00 23. 31
	atom	607	N	VAL	78	30. 292	27. 159	15. 500	1. 00 28. 73
	atom	608	CA	VAL	78	31. 698	26. 785	15. 522	1. 00 28. 31
10	atom	609	СВ	VAL	78	31. 869	25. 319	15. 059	1. 00 22. 98
	atom	610	CG1	VAL	78	33. 326	24. 954	14. 999	1. 00 24. 21
	atom	611	CG2	VAL	78	31. 130	24. 389	16. 008	1. 00 27. 29
	atom	612	С	VAL	78	32. 623	27. 664	14. 682	1. 00 30. 31
	atom	613	0	VAL	78	32. 320	28. 012	13. 547	1. 00 31. 32
15	atom	614	N	LYS	79	33. 742	28. 053	15. 276	1. 00 32. 75
	atom	615	CA	LYS	79	34. 746	28. 820	14. 567	1. 00 34. 72
	atom	616	CB	LYS	79	35. 109	30. 116	15. 296	1. 00 33. 13
	atom	617	CG	LYS	79	36. 261	30. 890	14. 628	1. 00 35. 72
	atom	618	CD	LYS	79	36. 018	32. 411	14. 590	1. 00 35. 69
20	atom	619	CE	LYS	79	37. 339	33. 186	14. 505	1. 00 33. 64
	atom	620	NZ	LYS	79	37. 140	34. 666	14. 643	1. 00 29. 37
	atom	621	C	LYS	79	35. 933	27. 862	14. 567	1. 00 34. 91
	atom	622	0	LYS	79	36. 405	27. 444	15. 617	1. 00 39. 77
	atom	623	N	ALA	80	36. 367	27. 466	13. 383	1. 00 32. 01
25	atom	624	CA	ALA	80	37. 488	26. 564	13. 247	1. 00 31. 60
	atom	625	CB	ALA	80	37. 036	25. 260	12.609	1. 00 33. 03
	atom	626	C	ALA	80	38. 512	27. 270	12. 370	1. 00 31. 62
	atom	627	0	ALA	80	38. 201	28. 228	11. 672	1. 00 30. 86
	atom	628	N	LYS	81	39. 745	26. 810	12. 403	1. 00 32. 87
3 0	atom	629	CA	LYS	81	40. 744	27. 473	11. 605	1. 00 39. 04
	atom	630	CB	LYS	81	41. 551	28. 417	12. 508	1. 00 44. 98
	atom	631	CG	LYS	81	40. 696	29. 521	13. 164	1. 00 48. 22
	atom	632	CD	LYS	81	41. 090	30. 929	12. 696	1. 00 53. 93
	atom	633	CE	LYS	81	39. 866	31. 788	12. 344	1. 00 60. 46
3 5	atom	634	NZ	LYS	81	40. 061	33. 259	12. 607	1. 00 55. 43
	atom	635	C	LYS	81	41. 637	26. 476	10. 884	1. 00 36. 02

	atom	636	0	LYS	81	41. 836	25. 363	11. 348	1. 00 36. 54
	atom	637	N	LEU	82	42. 157	26. 871	9. 732	1. 00 38. 69
	atom	638	CA	LEU	82	43. 019	25. 977	8. 971	1. 00 41. 74
	atom	639	CB	LEU	82	43. 277	26. 530	7. 571	1. 00 38. 50
5	atom	640	CG	LEU	82	43. 827	27. 943	7. 506	1. 00 42. 05
	atom	641	CD1	LEU	82	45. 345	27. 892	7. 518	1. 00 43. 62
	atom	642	CD2	LEU	82	43. 318	28. 622	6. 236	1. 00 44. 00
	atom	643	C	LEU	82	44. 320	25. 815	9. 713	1. 00 40. 84
	atom	644	0	LEU	82	44. 833	26. 772	10. 275	1. 00 45. 86
10	atom	645	N	LEU	83	44. 846	24. 600	9. 725	1. 00 42. 05
	atom	646	CA	LEU	83	46. 093	24. 318	10. 412	1. 00 42. 03
	atom	647	CB	LEU	83	46. 077	22. 891	10. 955	1. 00 45. 18
	atom	648	CG	LEU	83	45. 682	22. 763	12. 428	1. 00 44. 22
	atom	649	CD1	LEU	83	44. 252	23. 218	12. 603	1. 00 40. 69
15	atom	650	CD2	LEU	83	45. 866	21. 324	12. 894	1. 00 48. 10
	atom	651	C	LEU	83	47. 296	24. 492	9. 503	1. 00 42. 56
	atom	652	0	LEU	83	47. 434	23. 788	8. 500	1. 00 45. 28
	atom	653	N	SER	84	48. 173	25. 423	9. 862	1. 00 41. 78
	atom	654	CA	SER	84	49. 377	25. 676	9. 076	1. 00 43. 36
20	atom	655	CB	SER	84	50. 366	26. 533	9. 858	1. 00 41. 89
	atom	656	0G	SER	84	51. 163	25. 696	10. 675	1. 00 46. 93
	atom	657	C	SER	84	50. 049	24. 355	8. 742	1. 00 43. 47
	atom	658	0	SER	84	49. 926	23. 387	9. 487	1. 00 45. 37
	atom	659	N	VAL	85	50. 757	24. 329	7. 615	1. 00 42. 65
2 5	atom	660	CA	VAL	85	51. 465	23. 139	7. 159	1. 00 40. 02
	atom	661	CB	VAL	85	52. 556	23. 492	6. 143	1. 00 40. 79
	atom	662		VAL	85	52. 603	22. 432	5. 039	1. 00 31. 56
	atom	663		VAL	85	52. 326	24. 898	5. 623	1. 00 37. 48
	atom	664	С	VAL	85	52. 158	22. 399	8. 283	1. 00 38. 35
3 0	atom	665	0	VAL	85	51. 895	21. 223	8. 515	1. 00 35. 15
	atom	666	N	GLU	86	53. 068	23. 105	8. 945	1. 00 41. 71
	atom	667	CA	GLU	86	53. 849	22. 565	10. 053	1. 00 46. 68
	atom	668	CB	GLU	86	54. 530	23. 718	10. 804	1. 00 49. 13
	atom	669	CG	GLU	86	55. 543	23. 273	11. 850	1. 00 53. 84
3 5	atom	670	CD	GLU	86	56. 202	24. 449	12. 557	1. 00 57. 61
	atom	671	0E1	GLU	86	56. 415	25. 499	11. 906	1. 00 57. 48

	atom	672	0E2	GLU	86	56. 509	24. 322	13. 763	1. 00 55. 26
	atom	673	C	GLU	86	53. 003	21. 730	11. 024	1. 00 45. 28
	atom	674	0	GLU	86	53. 314	20. 558	11. 286	1. 00 45. 42
	atom	675	N	GLU	87	51. 938	22. 336	11. 550	1. 00 41. 57
5	atom	676	CA	GLU	87	51. 050	21. 648	12. 480	1. 00 40. 92
	atom	677	CB	GLU	87	49. 897	22. 558	12. 911	1. 00 43. 41
	atom	678	CG	GLU	87	50. 218	24. 031	13. 033	1. 00 43. 17
	atom	679	CD	GLU	87	49. 103	24. 781	13. 736	1. 00 48. 23
	atom	680	0E1	GLU	87	48. 904	24. 535	14. 947	1. 00 51. 88
10	atom	681	0E2	GLU	87	48. 418	25. 605	13. 085	1. 00 45. 74
	atom	682	C	GLU	87	50. 462	20. 413	11. 815	1. 00 40. 01
	atom	683	0	GLU	87	50. 352	19. 343	12. 424	1. 00 41. 18
	atom	684	N	ALA	88	50. 069	20. 582	10. 557	1. 00 37. 93
	atom	685	CA	ALA	88	49. 484	19. 509	9. 787	1. 00 32. 05
15	atom	686	CB	ALA	88	49. 147	20. 011	8. 399	1. 00 38. 95
	atom	687	C	ALA	88	50. 455	18. 345	9. 719	1. 00 30. 85
	atom	688	0	ALA	88	50. 087	17. 202	10. 001	1. 00 30. 25
	atom	689	N	CYS	89	51. 700	18. 637	9. 353	1. 00 33. 20
	atom	690	CA	CYS	89	52. 734	17. 598	9. 253	1. 00 35. 92
2 0	atom	691	CB	CYS	89	54. 068	18. 195	8. 781	1. 00 37. 45
	atom	692	SG	CYS	89	54. 037	19. 133	7. 232	1. 00 39. 47
	atom	693	C	CYS	89	52. 935	16. 940	10. 618	1. 00 34. 78
	atom	694	0	CYS	89	53. 176	15. 735	10. 710	1. 00 28. 20
	atom	695	N	LYS	90	52. 832	17. 752	11. 670	1. 00 36. 61
25	atom	696	CA	LYS	90	52. 989	17. 281	13. 042	1. 00 35. 73
	atom	697	CB	LYS	90	52. 757	18. 446		1. 00 40. 25
	atom	698	CG	LYS	90	53. 894	19. 470	14. 056	1. 00 39. 78
	atom	699	CD	LYS	90	53. 742		15. 285	1. 00 40. 47
	atom	700	CE	LYS	90	53. 888	21. 857	14. 931	1. 00 40. 65
3 0	atom	701	NZ	LYS	90	54. 520	22. 655	16. 026	1. 00 37. 75
	atom	702	C	LYS	90	52. 009	16. 141	13. 349	1. 00 34. 09
	atom	703	0	LYS	90	52. 411	15. 076	13. 823	1. 00 33. 58
	atom	704	N	LEU	91	50. 727	16. 361	13. 067	1. 00 30. 64
	atom	705	CA	LEU	91	49. 706	15. 336	13. 317	1. 00 31. 32
3 5	atom	706	CB	LEU	91	48. 299	15. 909	13. 041	1. 00 29. 65
	atom	707	CG	LEU	91	47. 937	17. 261	13. 661	1. 00 29. 77

	atom	708	CD1	I FII	91	46. 491	17. 609	13. 371	1. 00 27. 02
	atom	709	CD2		91	48. 149	17. 208	15. 150	1. 00 28. 96
	atom	710	C	LEU	91	49. 894	14. 045	12. 495	1. 00 29. 18
	atom	711	0	LEU	91	49. 156	13. 060	12. 669	1. 00 24. 10
-		712	N	THR	92	50. 889	14. 031	11. 616	1. 00 24. 18
5	atom			THR	92	51. 079	12. 858	10. 777	1. 00 28. 44
	atom	713	CA			51. 677	13. 241	9. 420	1. 00 28. 48
	atom	714	CB	THR	92				1. 00 20. 48
	atom	715	0G1	THR	92	50. 954	14. 357	8. 884	1. 00 22. 03
	atom	716		THR	92	51. 604	12. 057	8. 458	
10	atom	717	C	THR	92	51. 904	11. 743	11. 397	1. 00 30. 83
	atom	718	0	THR	92	53. 055	11. 937	11. 790	1. 00 27. 27
	atom	719	N	PRO	93	51. 315	10. 541	11. 470	1. 00 30. 23
	atom	720	CD	PRO	93	49. 962	10. 222	10. 983	1. 00 26. 81
	atom	721	CA	PRO	93	51. 984	9. 382	12. 047	1. 00 31. 46
15	atom	722	CB	PRO	93	50. 877	8. 338	12. 157	1. 00 27. 95
	atom	723	CG	PR0	93	49. 875	8. 737	11. 148	1. 00 27. 44
	atom	724	C	PRO	93	53. 137	8. 920	11. 195	1. 00 38. 55
	atom	725	0	PR0	93	53. 051	8. 926	9. 968	1. 00 42. 88
	atom	726	N	PR0	94	54. 247	8. 526	11. 839	1. 00 44. 22
2 0	atom	727	CD	PRO	94	54. 416	8. 532	13. 302	1. 00 42. 29
	atom	728	CA	PRO	94	55. 455	8. 046	11. 158	1. 00 45. 63
	atom	729	CB	PR0	94	56. 553	8. 167	12. 220	1. 00 44. 07
	atom	730	CG	PRO	94	55. 882	8. 755	13. 454	1. 00 41. 67
	atom	731	C	PR0	94	55. 256	6. 610	10. 710	1. 00 50. 09
25	atom	732	0	PR0	94	56. 194	5. 814	10. 691	1. 00 54. 82
	atom	733	N .	HIS	95	54. 017	6. 286	10. 364	1. 00 53. 67
	atom	734	CA	HIS	95	53. 654	4. 946	9. 913	1. 00 57. 80
	atom	735	CB	HIS	95	52. 855	4. 220	11. 006	1. 00 63. 80
	atom	736	CG	HIS	95	53. 629	3. 970	12. 260	1. 00 69. 07
3 0	atom	737	CD2	HIS	95	53. 856	4. 756	13. 340	1. 00 72. 38
	atom	738	ND1	HIS	95	54. 292	2. 785	12. 501	1. 00 71. 73
	atom	739	CE1	HIS	95	54. 895	2. 851	13. 675	1. 00 73. 76
	atom	740	NE2	HIS	95	54. 647	4. 036	14. 205	1. 00 75. 05
	atom	741	C	HIS	95	52. 799	5. 030	8. 645	1. 00 55. 40
3 5	atom	742	0	HIS	95	52. 527	4. 016	7. 999	1. 00 55. 81
	atom	743	N	SER	96	52. 372	6. 244	8. 305	1. 00 53. 91

	atom	744	CA	SER	96	51. 531	6. 472	7. 133	1. 00 52. 92
	atom	745	CB	SER	96	51. 193	7. 963	7. 003	1. 00 50. 23
	atom	746	0G	SER	96	49. 841	8. 210	7. 345	1. 00 52. 35
	atom	747	C	SER	96	52. 163	5. 979	5. 835	1. 00 51. 06
5	atom	748	0	SER	96	53. 388	5. 939	5. 698	1. 00 49. 44
	atom	749	N	ALA	97	51. 307	5. 593	4. 890	1. 00 49. 46
	atom	750	CA	ALA	97	51. 756	5. 121	3. 591	1. 00 45. 65
	atom	751	CB	ALA	97	50. 561	4. 674	2. 764	1. 00 44. 44
	atom	752	C	ALA	97	52. 468	6. 294	2. 925	1. 00 42. 76
10	atom	753	0	ALA	97	51. 954	7. 416	2. 924	1. 00 40. 92
	atom	754	N	LYS	98	53. 649	6. 043	2. 370	1. 00 41. 52
	atom	755	CA	LYS	98	54. 407	7. 113	1. 740	1. 00 42. 05
	atom	756	CB	LYS	98	55. 803	6. 637	1. 325	1. 00 45. 33
	atom	757	CG	LYS	98	55. 893	5. 176	0. 910	1. 00 52. 15
15	atom	758	CD	LYS	98	57. 225	4. 882	0. 200	1. 00 55. 56
	atom	759	CE	LYS	98	57. 951	3. 666	0. 803	1. 00 60. 84
	atom	760	NZ	LYS	98	59. 091	4. 017	1. 720	1. 00 57. 80
	atom	761	C	LYS	98	53. 682	7. 669	0. 540	1. 00 40. 45
	atom	762	0	LYS	98	52. 762	7. 048	0. 009	1. 00 38. 78
20	atom	763	N	SER	99	54. 094	8. 860	0. 131	1. 00 39. 53
	atom	764	CA	SER	99	53. 502	9. 535	-1. 019	1. 00 38. 92
	atom	765	CB.	SER	99	53. 896	11. 017	-1. 007	1. 00 37. 52
	atom	766	0G	SER	99	53. 532	11. 664	-2. 210	1. 00 39. 62
	atom	767	C	SER	99	54. 015	8. 874	-2. 290	1. 00 38. 92
25	atom	768	0	SER	99	55. 129	8. 339	-2. 320	1. 00 37. 85
	atom	769	N	LYS	100	53. 199	8. 895	-3. 335	1. 00 38. 61
	atom	770	CA	LYS	100	53. 610	8. 314	-4. 603	1. 00 38. 93
	atom	771	CB	LYS	100	52. 384	7. 997	-5. 472	1. 00 39. 20
	atom	772	CG	LYS	100	51. 381	7. 066	-4. 797	1. 00 41. 56
3 0	atom	773	CD	LYS	100	50. 672	6. 138	-5. 782	1. 00 42. 55
	atom	774	CE	LYS	100	49. 883	6. 929	-6. 824	1. 00 46. 92
	atom	775	NZ	LYS	100	48. 395	6. 748	-6. 711	1. 00 45. 76
	atom	776	C	LYS	100	54. 470	9. 372	-5. 272	1. 00 36. 95
	atom	777	0	LYS	100	54. 808	9. 277	-6. 444	1. 00 41. 42
3 5	atom	778	N	PHE	101	54. 825	10. 388	-4. 503	1. 00 36. 94
	atom	779	CA	PHE	101	55. 625	11. 482	-5. 018	1. 00 36. 82

		700	СВ	PHE	101	54. 877	12. 805	-4. 833	1. 00 38. 05
	atom	780 701	CG	PHE	101	53. 559	12. 877	-5. 566	1. 00 41. 28
	atom	781		PHE	101	52. 392	12. 400	-4. 977	1. 00 43. 57
	atom	782	CD1			52. 392	13. 455	-6. 827	1. 00 44. 60
	atom	783	CD2		101		12. 499	-5. 630	1. 00 41. 45
5	atom	784	CE1		101	51. 164		-7. 489	1. 00 41. 43
	atom	785	CE2		101	52. 254	13. 560		1. 00 40. 72
	atom	786	CZ	PHE	101	51. 095	13. 079	-6. 883	1. 00 45. 75
	atom	787	C	PHE	101	57. 015	11. 600	-4. 397	
	atom	788	0	PHE	101		12. 708	-4. 234	1. 00 36. 78
10	atom	789	N	GLY	102	57. 625	10. 479	-4. 029	1. 00 32. 70
	atom	790	CA	GLY	102	58. 973	10. 550	-3. 491	1. 00 37. 31
	atom	791	C	GLY	102	59. 210	10. 698	-1. 998	1. 00 40. 11
	atom	792	0	GLY	102	60. 090	10. 035	-1. 452	1. 00 43. 81
	atom	793	N	TYR	103	58. 446	11. 559	-1. 334	1. 00 39. 26
15	atom	794	CA	TYR	103	58. 609	11. 784	0. 096	1. 00 35. 00
	atom	795	CB	TYR	103	58. 399	13. 270	0. 409	1. 00 38. 56
	atom	796	CG	TYR	103	56. 984	13. 746	0. 170	1. 00 43. 82
	atom	797	CD1	TYR	103	56. 087	13. 896	1. 231	1. 00 44. 08
	atom	798	CE1	TYR	103	54. 774	14. 281	1. 009	1. 00 39. 21
2 0	atom	799	CD2	TYR	103	56. 522	14. 003	-1. 123	1. 00 41. 55
	atom	800	CE2	TYR	103	55. 208	14. 389	-1. 350	1. 00 38. 72
	atom	801	CZ	TYR	103	54. 343	14. 518	-0. 281	1. 00 39. 56
	atom	802	OH	TYR	103	53. 031	14. 835	-0. 515	1. 00 37. 93
	atom	803	С	TYR	103	57. 665	10. 942	0. 951	1. 00 32. 59
25	atom	804	0	TYR	103	56. 492	10. 797	0. 632	1. 00 29. 69
	atom	805	N	GLY	104	58. 191	10. 408	2. 052	1. 00 32. 00
	atom	806	CA	GLY	104	57. 394	9. 589	2. 952	1. 00 25. 84
	atom	807	С	GLY	104	56. 983	10. 318	4. 223	1. 00 25. 38
	atom	808	0	GLY	104	57. 114	11. 548	4. 312	1. 00 24. 18
3 0	atom	809	N	ALA	105	56. 508	9. 550	5. 209	1. 00 24. 20
	atom	810	CA	ALA	105	56. 037	10. 080	6. 494	1. 00 23. 76
	atom	811	CB	ALA	105	55. 611	8. 922	7. 407	1. 00 26. 92
	atom	812	C	ALA	105	57. 011	10. 984	7. 234	1. 00 24. 90
	atom	813	0	ALA	105	56. 660	12. 095	7. 592	1. 00 25. 76
3 5	atom	814	N	LYS	106	58. 233	10. 516	7. 461	1. 00 30. 07
	atom	815	CA	LYS	106	59. 236	11. 306	8. 177	1. 00 33. 58

	atom	816	CB	LYS	106	60. 552	10. 538	8. 272	1. 00 35. 25
	atom	817	CG	LYS	106	60. 434	9. 081	8. 660	1. 00 37. 37
	atom	818	CD	LYS	106	61. 755	8. 348	8. 415	1. 00 39. 21
	atom	819	CE	LYS	106	62. 944	9. 043	9. 098	1. 00 42. 05
5	atom	820	NZ	LYS	106	63. 712	9. 962	8. 187	1. 00 45. 24
	atom	821	C	LYS	106	59. 510	12. 683	7. 554	1. 00 38. 58
	atom	822	0	LYS	106	59. 422	13. 715	8. 236	1. 00 41. 15
	atom	823	N	ASP	107	59. 853	12. 704	6. 268	1. 00 38. 63
	atom	824	CA	ASP	107	60. 118	13. 969	5. 594	1. 00 38. 65
10	atom	825	CB	ASP	107	60. 298	13. 752	4. 096	1. 00 40. 04
	atom	826	CG	ASP	107	61. 279	12. 671	3. 798	1. 00 40. 25
	atom	827	0D1	ASP	107	60. 843	11. 515	3. 609	1. 00 44. 96
	atom	828	0D2	ASP	107	62. 486	12. 982	3. 772	1. 00 40. 23
	atom	829	C	ASP	107	58. 950	14. 903	5. 832	1. 00 38. 71
15	atom	830	0	ASP	107	59. 133	16. 118	5. 913	1. 00 40. 03
	atom	831	N	VAL	108	57. 754	14. 323	5. 938	1. 00 38. 49
	atom	832	CA	VAL	108	56. 544	15. 093	6. 190	1. 00 39. 25
	atom	833	CB	VAL	108	55. 254	14. 240	6. 177	1. 00 38. 78
	atom	834	CG1	VAL	108	54. 088	15. 088	6. 680	1. 00 36. 21
20	atom	835	CG2	VAL	108	54. 968	13. 715	4. 776	1. 00 38. 69
	atom	836	С	VAL	108	56. 639	15. 698	7. 570	1. 00 40. 88
	atom	837	0	VAL	108	56. 140	16. 798	7. 798	1. 00 42. 42
	atom	838	N	ARG	109	57. 259	14. 982	8. 501	1. 00 39. 54
	atom	839	CA	ARG	109	57. 375	15. 533	9. 839	1. 00 44. 71
25	atom	840	CB	ARG	109	57. 485	14. 429	10. 897	1. 00 44. 04
	atom	841	CG	ARG	109	57. 175	14. 978	12. 297	1. 00 46. 40
	atom	842	CD	ARG	109	57. 340	13. 959	13. 411	1. 00 46. 18
	atom	843	NE	ARG	109	56. 074	13. 345	13. 797	1. 00 40. 34
	atom	844	CZ	ARG	109	55. 647	12. 189	13. 307	1. 00 43. 34
3 0	atom	845	NH1	ARG	109	56. 390	11. 536	12. 418	1. 00 44. 24
	atom	846	NH2	ARG	109	54. 488	11. 682	13. 701	1. 00 39. 95
	atom	847	C	ARG	109	58. 557	16. 492	9. 979	1. 00 44. 27
	atom	848	0	ARG	109	58. 488	17. 464	10. 733	1. 00 45. 55
	atom	849	N	ASN	110	59. 628	16. 237	9. 235	1. 00 42. 68
3 5	atom	850	CA	ASN	110	60. 813	17. 080	9. 318	1. 00 41. 58
	atom	851	CB	ASN	110	62. 028	16. 327	8. 776	1. 00 42. 25

	atom	852	CG	ASN	110	62. 223	14. 976	9. 444	1. 00 43 61
	atom	853	0D1	ASN	110	61. 431	14. 562	10. 297	1. 00 43. 54
	atom	854	ND2		110	63. 282	14. 277	9. 055	1. 00 49. 56
	atom	855	C	ASN	110	60. 675	18. 411	8. 594	1. 00 40. 58
5	atom	856	0	ASN	110	61. 528	19. 289	8. 737	1. 00 40. 24
3	atom	857	N	LEU	111	59. 600	18. 560	7. 828	1. 00 39. 98
	atom	858	CA	LEU	111	59. 350	19. 787	7. 061	1. 00 40. 96
	atom	859	СВ	LEU	111	59. 470	21. 027	7. 981	1. 00 43. 73
	atom	860	CG	LEU	111	58. 245	21. 493	8. 806	1. 00 44. 77
10	atom	861	CD1	LEU	111	58. 270	23. 014	8. 942	1. 00 43. 32
	atom	862		LEU	111	56. 932	21. 055	8. 136	1. 00 43. 76
	atom	863	C	LEU	111	60. 313	19. 903	5. 861	1. 00 36. 53
	atom	864	0	LEU	111	60. 836	20. 974	5. 581	1. 00 33. 61
	atom	865	N	SER	112	60. 521	18. 784	5. 161	1. 00 37. 08
15	atom	866	CA	SER	112	61. 408	18. 702	3. 993	1. 00 37. 95
	atom	867	СВ	SER	112	61. 636	17. 239	3. 620	1. 00 35. 33
	atom	868	OG	SER	112	61. 881	16. 443	4. 772	1. 00 40. 02
	atom	869	С	SER	112	60. 896	19. 451	2. 758	1. 00 42. 04
	atom	870	0	SER	112	59. 685	19. 503	2. 507	1. 00 43. 96
20	atom	871	N	SER	113	61. 821	20. 017	1. 979	1. 00 42. 58
	atom	872	CA	SER	113	61. 442	20. 762	0. 777	1. 00 42. 22
	atom	873	CB	SER	113	62. 692	21. 302	0. 038	1. 00 39. 75
	atom	874	0G	SER	113	63. 534	20. 272	-0. 463	1. 00 37. 28
	atom	875	C	SER	113	60. 580	19. 920	-0. 174	1. 00 41. 06
25	atom	876	0	SER	113	59. 622	20. 429	-0. 761	1. 00 36. 23
	atom	877	N	LYS	114	60. 899	18. 636	-0. 320	1. 00 37. 37
	atom	878	CA	LYS	114	60. 102	17. 811	-1. 219	1. 00 37. 95
	atom	879	CB	LYS	114	60. 759	16. 434	-1. 449	1. 00 39. 06
	atom	880	CG	LYS	114	61. 015	15. 611	-0. 194	1. 00 43. 80
3 0	atom	881	CD	LYS	114	62. 256	14. 721	-0. 361	1. 00 44. 68
	atom	882	CE	LYS	114	61. 916	13. 233	-0. 326	1. 00 45. 40
	atom	883	NZ	LYS	114	61. 253	12. 772	-1. 592	1. 00 45. 38
	atom	884	C	LYS	114	58. 708	17. 650	-0. 630	1. 00 33. 14
	atom	885	0	LYS	114	57. 705	17. 668	-1. 348	1. 00 29. 12
3 5	atom	886	N	ALA	115	58. 645	17. 515	0. 688	1. 00 30. 70
	atom	887	CA	ALA	115	57. 363	17. 346	1. 351	1. 00 27. 33

```
1.00 29.72
                                                     16.838
                                                                2. 757
                                            57. 576
                     CB
                          ALA
                                 115
               888
      atom
                                                                        1. 00 25. 15
                                                     18. 623
                                                                1. 370
                                            56. 540
                     C
                          ALA
                                 115
      atom
               889
                                                                        1. 00 25. 23
                                            55. 506
                                                     18. 710
                                                                0.720
               890
                     0
                          ALA
                                 115
      atom
                                                                2.091
                                                                        1. 00 25. 45
                                                     19. 633
               891
                     N
                          VAL
                                 116
                                            56. 997
      atom
                                            56. 208
                                                     20.850
                                                                2. 160
                                                                        1. 00 29. 58
                          VAL
                                 116
      atom
               892
                     CA
 5
                                                                        1.00 31.94
                                            56. 807
                                                     21.875
                                                                3. 170
                     CB
                          VAL
               893
                                 116
      atom
                                                                         1. 00 30. 62
                                            57. 757
                                                     21. 178
                                                                4. 135
                     CG1 VAL
                                 116
               894
      atom
                                                                        1. 00 32. 05
                                                                2. 432
                                            57. 486
                                                     23. 011
                     CG2 VAL
                                 116
      atom
               895
                                                     21. 526
                                                                0.814
                                                                        1. 00 30. 56
                     C
                          VAL
                                 116
                                            55. 982
               896
      atom
                                            55. 136
                                                      22. 424
                                                                0. 691
                                                                         1. 00 31. 18
                          VAL
                                 116
               897
                     0
      atom
10
                                                               -0.197
                                                                         1. 00 34. 10
                                            56. 741
                                                      21. 107
                          ASN
                                 117
               898
      atom
                     N
                                                               -1.534
                                                                         1. 00 28. 81
                                            56. 585
                                                      21. 673
                          ASN
                                 117
               899
                     CA
      atom
                                                               -2.352
                                                                         1. 00 30. 56
                                            57.845
                                                      21. 486
                     CB
                          ASN
                                 117
               900
      atom
                                                               -2. 281
                                                                         1. 00 34. 70
                                                      22. 691
                                            58. 738
                          ASN
                                 117
      atom
               901
                     CG
                                                                         1. 00 33. 31
                                            58. 260
                                                      23. 812
                                                               -2.089
               902
                     OD1 ASN
                                 117
15
      atom
                                                                         1.00 34.40
                                                               -2.421
                                 117
                                            60. 044
                                                      22. 477
               903
                     ND2 ASN
      atom
                                            55. 416
                                                      20.997
                                                               -2.214
                                                                         1. 00 30. 73
                     C
                          ASN
                                 117
                904
      atom
                                                                         1.00 32.39
                                                      21.674
                                                               -2.774
                          ASN
                                 117
                                            54. 545
               905
                     0
      atom
                                                                         1.00 28.42
                                                               -2.168
                                                      19. 665
                                 118
                                            55. 383
                906
                     N
                          HIS
      atom
                                                      18. 959
                                                               -2. 757
                                                                         1.00 29.70
                                            54. 260
                     CA
                          HIS
                                  118
      atom
                907
20
                                                                         1. 00 30. 32
                                                      17. 447
                                                               -2. 645
                908
                     CB
                          HIS
                                  118
                                            54. 415
      atom
                                                                         1. 00 33. 54
                                                      16. 692
                                                               -3.412
                          HIS
                                  118
                                            53. 374
                909
                     CG
      atom
                     CD2 HIS
                                  118
                                             53. 242
                                                      16. 450
                                                               -4.740
                                                                         1. 00 35. 37
                910
      atom
                                                                         1.00 36.29
                                             52. 283
                                                      16. 106
                                                               -2.809
                      ND1 HIS
                911
                                  118
      atom
                                                               -3.729
                                                                         1.00 34.25
                                             51. 524
                                                      15. 536
                      CE1 HIS
                                  118
                912
25
      atom
                                                                         1.00 34.76
                                                               -4.910
                      NE2 HIS
                                  118
                                             52. 083
                                                      15. 732
      atom
                913
                                                                         1. 00 29. 99
                                                      19. 387
                                                               -2.032
                                             52. 985
      atom
                914
                      C
                           HIS
                                  118
                                             51. 999
                                                      19. 755
                                                               -2. 677
                                                                         1. 00 29. 65
                                  118
                915
                      0
                           HIS
      atom
                                             53.007
                                                      19. 358
                                                               -0. 696
                                                                         1. 00 27. 46
                916
                      N
                           ILE
                                  119
       atom
                                                                         1.00 24.42
                                                                 0.078
                                             51.830
                                                      19. 758
                                  119
                917
                      CA
                           ILE
30
       atom
                                                      19. 945
                                                                 1.620
                                                                         1. 00 24. 65
                                             52. 118
                      CB
                           ILE
                                  119
                918
       atom
                                                                         1. 00 20. 54
                                                      20. 085
                                                                 2. 361
                      CG2 ILE
                                  119
                                             50. 793
       atom
                919
                                                                 2. 211
                                                                         1. 00 17. 58
                                             52. 950
                                                      18. 796
       atom
                920
                      CG1 ILE
                                  119
                                                      17. 472
                                                                 1. 551
                                                                         1. 00 15. 70
                      CD1 ILE
                                  119
                                             52. 759
                921
       atom
                                             51. 294
                                                      21. 100
                                                                -0.437
                                                                         1. 00 25. 51
                922
                      C
                           ILE
                                  119
       atom
35
                                                                -0.673
                                                                         1. 00 29. 09
                                                      21. 243
                                  119
                                             50. 091
                923
                      0
                           ILE
       atom
```

	a t a m	924	N H	118	120	52. 178	22. 079	-0. 617	1. 00 23. 27
	atom	925		11S	120	51. 754	23. 406	-1. 080	1. 00 28. 30
	atom	926		11S	120	52. 927	24. 401	-1. 069	1. 00 30. 07
	atom			HIS	120	53. 039	25. 200	0. 197	1. 00 33. 49
_	atom	927	CD2 F		120	52. 237	26. 162	0. 719	1. 00 35. 05
5	atom	928				54. 108	25. 086	1. 063	1. 00 30. 46
	atom	929		HIS	120	54. 108 53. 961	25. 944	2. 057	1. 00 34. 16
	atom	930		HIS	120	52. 834	26. 610	1. 872	1. 00 34. 10
	atom	931	NE2 H		120			-2. 483	1. 00 30. 03
	atom	932		HIS	120	51. 190	23. 321	-2. 4 63	1. 00 27. 63
10	atom	933		HIS	120	50. 467	24. 209		1. 00 28. 55
	atom	934		SER	121	51. 524	22. 236	-3. 163	1. 00 27. 33
	atom	935		SER	121	51. 071	22. 030	-4. 517 - 210	1. 00 20. 43
	atom	936		SER	121	52. 001	21. 055	-5. 219	
	atom	937		SER	121	51. 649	19. 736	-4. 876	1. 00 39. 03
15	atom	938		SER	121	49. 642	21. 512	-4. 531	1. 00 29. 23
	atom	939		SER	121	48. 781	22. 064	-5. 234	1. 00 27. 16
	atom	940		VAL	122	49. 397	20. 448	-3. 765	1. 00 24. 86
	atom	941		VAL	122	48. 061	19. 871	-3. 671	1. 00 19. 27
	atom	942		VAL	122	47. 981	18. 827	-2. 557	1. 00 18. 10
2 0	atom	943		VAL	122	46. 710	18. 056	-2. 670	1. 00 19. 73
	atom	944	CG2		122	49. 175	17. 901	-2. 612	1. 00 14. 09
	atom	945		VAL	122	47. 122	21. 014	-3. 306	1. 00 24. 73
	atom	946		VAL	122	46. 080	21. 214	-3. 937	1. 00 29. 01
	atom	947		TRP	123	47. 518	21. 778	-2. 294	1. 00 24. 11
25	atom	948		TRP	123	46. 736	22. 905	-1. 817	1. 00 23. 68
	atom	949		TRP	123	47. 474			1. 00 21. 51
	atom	950		TRP	123	46. 631	24. 562	0. 083	1. 00 24. 63
	atom	951	CD2		123	45. 661	24. 270	1. 100	1. 00 24. 83
	atom	952	CE2	TRP	123	45. 100	25. 507	1. 512	1. 00 26. 60
3 0	atom	953	CE3	TRP	123	45. 205	23. 086	1. 703	1. 00 21. 62
	atom	954	CD1	TRP	123	46. 620	25. 922	-0. 076	1. 00 25. 58
	atom	955	NE1	TRP	123	45. 705	26. 497	0. 779	1. 00 26. 32
	atom	956	CZ2	TRP	123	44. 103	25. 589	2. 505	1. 00 23 81
	atom	957	CZ3	TRP	123	44. 208	23. 173	2. 697	1. 00 17. 40
3 5	atom	958	CH2	TRP	123	43. 674	24. 411	3. 080	1. 00 19. 50
	atom	959	C	TRP	123	46. 437	23. 932	-2. 908	1. 00 27. 15

```
-3. 116
                                                                        1.00 26.13
                                                     24. 340
                                           45. 278
               960
                    0
                          TRP
                                 123
      atom
                                                              -3.592
                                                                        1.00 27.03
                                            47. 489
                                                     24. 368
                                 124
                     N
                          LYS
      atom
               961
                                                                        1.00 27.60
                                            47. 331
                                                     25. 343
                                                              -4.652
                         LYS
                                 124
               962
                     CA
      atom
                                                              -5. 310
                                                                        1. 00 33. 72
                                                     25. 610
               963
                     CB
                          LYS
                                 124
                                            48. 684
      atom
                                                                        1. 00 40. 99
                                            49. 053
                                                     27. 077
                                                              -5. 428
                     CG
                         LYS
                                 124
               964
      atom
 5
                                                              -6.833
                                                                        1.00 41.84
                                            49. 540
                                                     27. 423
                     CD
                          LYS
                                 124
               965
      atom
                                                              -7.485
                                                                        1. 00 47. 34
                                                     28. 500
                     CE
                          LYS
                                 124
                                            48. 672
               966
      atom
                                                                        1. 00 50. 55
                                                     28. 970
                                                              -6.607
                                            47. 546
                     NZ
                          LYS
                                 124
      atom
               967
                                                                        1.00 30.14
                                                     24. 749
                                                               -5.669
                     C
                          LYS
                                 124
                                            46. 347
               968
      atom
                                                                        1. 00 32. 78
                                            45. 470
                                                     25. 442
                                                               -6.194
               969
                     0
                          LYS
                                 124
      atom
10
                                                              -5.928
                                                                        1. 00 24. 17
                                            46. 490
                                                     23. 454
                          ASP
                                 125
               970
                     N
      atom
                                                                        1. 00 26. 07
                          ASP
                                 125
                                            45. 624
                                                     22. 772
                                                               -6.865
                     CA
               971
      atom
                                                                        1. 00 28. 24
                                                               -7. 197
                                            46. 210
                                                     21. 410
               972
                     CB
                          ASP
                                 125
      atom
                                                               -8.211
                                                                        1.00 30.03
                                                     20.679
                          ASP
                                 125
                                            45. 393
               973
                     CG
      atom
                                                                        1. 00 31. 48
                                 125
                                            44. 765
                                                     19. 662
                                                               -7. 849
                974
                     OD1 ASP
      atom
15
                                                                        1. 00 34. 25
                                                               -9.373
                     OD2 ASP
                                 125
                                            45. 375
                                                     21. 131
                975
      atom
                                            44. 198
                                                     22. 602
                                                               -6.332
                                                                        1. 00 27. 25
                     C
                          ASP
                                 125
                976
      atom
                                                                         1.00 23.54
                                            43. 231
                                                     22. 810
                                                               -7.057
                977
                     0
                          ASP
                                 125
      atom
                                                                         1.00 29.03
                                                     22. 214
                                                               -5.061
                                 126
                                            44. 078
                978
                      N
                          LEU
      atom
                                                                         1. 00 26. 92
                                            42. 777
                                                      22. 032
                                                               -4.417
                      CA
                                 126
                979
                          LEU
20
      atom
                                                                         1.00 31.95
                                            42. 953
                                                               -2.932
                                                      21. 695
                980
                      CB
                          LEU
                                 126
      atom
                                                               -2.347
                                                                         1. 00 31. 46
                                                      20. 298
                981
                      CG
                          LEU
                                 126
                                            42. 677
      atom
                                                               -3.428
                                                                         1. 00 31. 01
                      CD1 LEU
                                 126
                                            42.691
                                                      19. 259
                982
      atom
                                                               -1.291
                                                                         1. 00 27. 21
                                            43. 732
                                                      19. 964
                      CD2 LEU
                                  126
      atom
                983
                                                                         1. 00 28. 21
                                            42.000
                                                      23. 325
                                                               -4.544
                                  126
                      C
                          LEU
                984
25
      atom
                                                               -4.721
                                                                         1. 00 31. 19
                                                      23. 314
                      0
                          LEU
                                  126
                                            40. 787
                985
      atom
                                                                         1. 00 32. 51
                                                               -4.450
                                            42. 695
                                                      24. 453
                          LEU
                                  127
      atom
                986
                      N
                                                               -4. 582
                                                                         1. 00 33. 82
                                            42.021
                                                      25. 749
                987
                      CA
                          LEU
                                  127
       atom
                                                                         1. 00 33. 73
                                  127
                                            42.862
                                                      26. 874
                                                               -3.959
                988
                      CB
                          LEU
       atom
                                                               -2. 520
                                                                         1. 00 32. 63
                                                      27. 333
                                            42. 570
                      CG
                          LEU
                                  127
30
       atom
                989
                                                                         1.00 32.67
                                            43.875
                                                      27. 614
                                                               -1.812
                      CD1 LEU
                                  127
                990
       atom
                                                               -2. 521
                                                                         1. 00 32. 52
                                            41.709
                                                      28. 582
                991
                      CD2 LEU
                                  127
       atom
                                                               -6.051
                                                                         1. 00 34. 67
                                                      26.071
                                            41. 747
                                  127
       atom
                992
                      С
                           LEU
                                                      26. 581
                                                               -6.389
                                                                         1. 00 35. 01
                993
                      0
                           LEU
                                  127
                                            40. 684
       atom
                           GLU
                                            42. 697
                                                      25. 750
                                                               -6.925
                                                                         1. 00 37. 52
                994
                      N
                                  128
35
       atom
                                                                         1. 00 42. 22
                                                                -8.357
                                                      26. 037
                      CA
                           GLU
                                  128
                                             42. 554
                995
       atom
```

```
1.00 44.81
                                           43. 903
                                                     25.864
                                                              -9.064
               996
                     CB
                          GLU
                                 128
      atom
                                                                        1.00 48.63
                                           44. 962
                                                     26. 886
                                                              -8.659
                          GLU
                                 128
                     CG
      atom
               997
                                                                        1. 00 49. 49
                                           46. 323
                                                     26. 622
                                                              -9.300
                         GLU
                                 128
               998
                     CD
      atom
                                                                        1. 00 41. 93
                                                     25. 485
                                                              -9. 203
               999
                     OE1 GLU
                                 128
                                           46. 840
      atom
                                            46. 878
                                                     27. 566
                                                              -9.904
                                                                        1. 00 55. 45
                     OE2 GLU
                                 128
      atom
              1000
 5
                                                              -9.090 1.00 43.41
                                            41. 507
                                                     25. 192
                     C
                          GLU
                                 128
              1001
      atom
                                                              -9. 882
                                                                        1. 00 43. 52
                                            40.710
                                                     25. 717
                          GLU
                                 128
              1002
                     0
      atom
                                                                        1.00 41.66
                                                              -8. 829
                                 129
                                            41. 517
                                                     23. 886
                          ASP
      atom
              1003
                     N
                                                                        1. 00 40. 83
                                            40. 594
                                                     22. 958
                                                              -9. 477
                     CA
                          ASP
                                 129
              1004
      atom
                                                                        1. 00 36. 59
                                            41. 415
                                                     21. 847 -10. 155
              1005
                     CB
                          ASP
                                 129
      atom
10
                                                     20.706 -10.689
                                                                        1. 00 37. 69
                                            40. 556
                          ASP
                                 129
              1006
                     CG
      atom
                                                                        1. 00 33. 70
                     OD1 ASP
                                 129
                                            41.134
                                                     19. 702 -11. 161
              1007
      atom
                                                                        1. 00 33. 52
                                                     20. 808 -10. 635
                                            39. 315
              1008
                     OD2 ASP
                                 129
      atom
                                                              -8.475
                                                                        1.00 42.15
                                            39. 590
                                                     22. 371
                                 129
              1009
                     C
                          ASP
      atom
                                                                        1. 00 46. 87
                                 129
                                            39. 976
                                                     21. 865
                                                               -7. 417
              1010
                     0
                          ASP
      atom
15
                                                     22. 433
                                                                        1. 00 37. 86
                                                               -8. 811
                          THR
                                 130
                                            38. 304
              1011
                     N
      atom
                                            37. 261
                                                     21. 914
                                                               -7.930
                                                                        1. 00 34. 06
                          THR
                                 130
              1012
                     CA
      atom
                                                               -7.449
                                                                        1. 00 33. 25
                                                     23. 037
                     CB
                          THR
                                 130
                                            36. 360
              1013
      atom
                                                                        1. 00 40. 23
                                                     24. 282
                                                               -7. 581
                                            37. 053
                     OG1 THR
                                 130
              1014
      atom
                                                                        1. 00 40. 96
                                            35. 996
                                                     22. 816
                                                               -5.998
                     CG2 THR
                                 130
      atom
              1015
20
                                                                         1. 00 28. 72
                                                      20.840
                                                               -8. 543
              1016
                     C
                          THR
                                 130
                                            36. 367
      atom
                                                                        1. 00 26. 45
                                            35. 238
                                                      20. 625
                                                               -8.092
                          THR
                                 130
              1017
                     0
      atom
                                                                         1.00 24.00
                          VAL
                                 131
                                            36.869
                                                      20. 158
                                                               -9. 560
              1018
                     N
      atom
                                                      19. 127 -10. 212
                                                                         1. 00 22. 33
                                            36.084
                                 131
              1019
                     CA
                          VAL
      atom
                                                      19.654 -11.529
                                                                         1. 00 22. 42
                                 131
                                            35. 417
              1020
                     CB
                          VAL
25
      atom
                                                                         1. 00 16. 48
                                                      20. 761 -11. 221
                      CG1 VAL
                                  131
                                            34. 437
              1021
      atom
                                                                         1. 00 20. 73
                                                      20. 152 -12. 502
                                            36. 482
                      CG2 VAL
                                  131
      atom
               1022
                                                                         1.00 23.48
                                            36.869
                                                      17. 876 -10. 575
               1023
                      C
                          VAL
                                  131
      atom
                                                                         1. 00 29. 07
                                            36. 292
                                                      16. 799 -10. 689
               1024
                      0
                          VAL
                                  131
      atom
                                                                         1. 00 21. 43
                                                      17. 981 -10. 748
                                  132
                                            38. 174
               1025
                           THR
      atom
                      N
30
                                                                         1. 00 26. 51
                                            38. 876
                                                      16. 783 -11. 167
                                  132
               1026
                      CA
                          THR
      atom
                                                                         1. 00 28. 03
                                            40. 326
                                                      17. 069 -11. 656
               1027
                      CB
                           THR
                                  132
      atom
                                                                         1. 00 29. 16
                                                      18. 039 -12. 706
                      OG1 THR
                                            40. 295
                                  132
      atom
               1028
                                            40. 979
                                                      15. 776 -12. 191
                                                                         1. 00 20. 81
               1029
                      CG2 THR
                                  132
      atom
                                                                         1. 00 25. 49
                                             38. 944
                                                      15. 695 -10. 121
               1030
                      C
                           THR
                                  132
      atom
35
                                                                         1.00 21.33
                                                      15. 864 −9. 075
                           THR
                                  132
                                             39. 544
               1031
                      0
      atom
```

```
14. 547 -10. 401
                                                                         1.00 24.92
              1032
                     N
                          PR<sub>0</sub>
                                 133
                                            38. 324
      atom
                                                                         1. 00 24. 51
                          PR<sub>0</sub>
                                            37. 538
                                                     14. 190 -11. 591
              1033
                                 133
      atom
                     CD
                                                                         1.00 24 23
                                 133
                                            38. 373
                                                      13. 459 -9. 424
              1034
                     CA
                          PR0
      atom
                                                                         1. 00 20. 97
              1035
                     CB
                          PR0
                                 133
                                            37. 913
                                                      12. 255 -10. 222
      atom
                                                      12. 831 -11. 232
                                                                         1. 00 23. 00
                          PR0
                                 133
                                            36. 987
              1036
                     CG
 5
      atom
                                            39.803
                                                      13. 290
                                                               -8. 921
                                                                         1.00 23.05
                     C
                          PR0
                                 133
              1037
      atom
                                                               -9.666
                                                                         1. 00 18. 59
              1038
                          PR0
                                 133
                                            40. 754
                                                      13. 507
                     0
      atom
                                                      12. 950
                                                               -7. 647
                                                                         1. 00 21. 63
                          ILE
                                            39. 971
      atom
              1039
                     N
                                 134
                                                                         1. 00 18. 39
                     CA
                          ILE
                                 134
                                            41. 324
                                                      12. 746
                                                               -7. 172
              1040
      atom
                                                      13. 507
                                                               -5. 916
                                                                         1. 00 16. 31
              1041
                     CB
                          ILE
                                 134
                                            41.639
      atom
10
                                                               -5. 668
                                                                         1. 00 19. 82
                     CG2 ILE
                                            43. 124
                                                      13. 434
              1042
                                 134
      atom
                                                               -6. 097
                     CG1 ILE
                                            41. 243
                                                      14. 972
                                                                         1.00 19.78
                                 134
              1043
      atom
                                                               -4.891
                                                                         1. 00 25. 49
                     CD1 ILE
                                 134
                                            41. 493
                                                      15. 852
              1044
      atom
                                                                         1.00 18.04
                                            41. 535
                                                      11. 287
                                                               -6.945
                     C
                          ILE
                                 134
      atom
              1045
                                            40.664
                                                      10. 588
                                                               -6.434
                                                                         1. 00 20. 16
              1046
                     0
                          ILE
                                 134
      atom
15
                                                                         1. 00 20. 29
                          ASP
                                            42. 700
                                                      10.814
                                                               -7.361
              1047
                     N
                                 135
      atom
                                                       9.406
                                                               -7.226
                                                                         1.00 18.18
                          ASP
                                 135
                                            43.002
                     CA
              1048
      atom
                                                                         1.00 14.84
                          ASP
                                 135
                                            44. 367
                                                       9. 106
                                                               -7.848
              1049
                     CB
      atom
                                                                         1.00 20.47
                                            44. 607
                                                       7.619
                                                               -8.020
                                 135
              1050
                     CG
                          ASP
      atom
                                                               -7.608
                                                                         1. 00 22. 89
                     OD1 ASP
                                            45. 680
                                                       7. 130
                                 135
20
      atom
              1051
                                                                         1.00 22.60
              1052
                     OD2 ASP
                                 135
                                            43. 718
                                                       6. 931
                                                               -8. 567
      atom
                     C
                          ASP
                                 135
                                            42. 981
                                                       8. 934
                                                               -5. 768
                                                                         1. 00 19. 45
              1053
      atom
                          ASP
                                 135
                                            43. 234
                                                       9.704
                                                               -4.825
                                                                         1. 00 12. 97
              1054
                     0
      atom
                                                                         1.00 17.34
                                            42.650
                                                       7. 663
                                                               -5.604
      atom
              1055
                     N
                          THR
                                 136
                                            42.660
                                                       7.030
                                                               -4.304
                                                                         1. 00 18. 09
                          THR
                                 136
              1056
                     CA
25
      atom
                                                               -3. 722
                          THR
                                 136
                                            41. 245
                                                       6.860
                                                                         1. 00 15. 30
              1057
                     CB
      atom
                                                               -4. 551
                                                                         1. 00 8. 12
                                            40. 495
                                                       5. 971
      atom
              1058
                     OG1 THR
                                 136
                                                                         1.00 14.26
                     CG2 THR
                                 136
                                            40. 532
                                                       8. 200
                                                               -3.614
              1059
      atom
                                                       5. 644
                                                               -4.580
                                                                         1. 00 23. 39
              1060
                     C
                          THR
                                 136
                                            43. 253
      atom
                                                                         1.00 21.41
                                                       5. 183
                                                               -5. 731
                          THR
                                 136
                                            43. 281
      atom
              1061
                     0
30
                                                       4. 995
                                                               -3.533
                                                                         1.00 21.68
                                            43. 752
              1062
                     N
                          THR
                                 137
      atom
                                                                         1.00 21.26
                     CA
                          THR
                                 137
                                            44. 305
                                                       3. 665
                                                               -3.669
              1063
      atom
                                                               -3.016
                                                                         1. 00 26. 31
                          THR
                                            45. 685
                                                       3. 564
      atom
              1064
                     CB
                                 137
                                                                         1. 00 28. 90
                     OG1 THR
                                 137
                                            46. 610
                                                       4. 402
                                                               -3.726
              1065
      atom
                                                       2. 103
                                                               -3.014
                                                                         1. 00 16. 36
              1066
                     CG2 THR
                                  137
                                            46. 163
35
      atom
                                                               -2.922
                                                                         1. 00 24. 37
                          THR
                                  137
                                            43. 340
                                                       2. 775
               1067
                     C
      atom
```

```
1.00 28.21
                                                              -2.014
                                           42.654
                                                      3. 238
              1068
                     0
                          THR
                                 137
      atom
                                                                       1.00 24.64
                                           43. 268
                                                      1. 507
                                                              -3.289
                          ILE
                                 138
              1069
                     N
      atom
                                           42. 360
                                                      0.601
                                                              -2.603
                                                                       1. 00 25. 62
                     CA
                          ILE
                                 138
              1070
      atom
                                                                       1.00 25.74
                                                      0. 248 -3. 527
              1071
                     CB
                          ILE
                                 138
                                           41. 184
      atom
                                                                       1.00 30.99
                     CG2 ILE
                                 138
                                            41. 709
                                                     -0. 457
                                                              -4. 785
              1072
      atom
 5
                                                                       1.00 24.67
                     CG1 ILE
                                 138
                                            40. 196
                                                     -0.663
                                                              -2.806
              1073
      atom
                                                              -3.679
                                                                       1.00 17.63
                                            39. 051
                                                     -1.123
              1074
                     CD1 ILE
                                 138
      atom
                                                                        1.00 28.00
                                                              -2. 211
                                 138
                                            43. 112
                                                     -0.675
                     C
                          ILE
      atom
              1075
                                            43. 899
                                                     -1.196
                                                              -2. 997
                                                                        1. 00 28. 97
              1076
                     0
                          ILE
                                 138
      atom
                                 139
                                            42. 881
                                                     -1. 174
                                                              -0.998
                                                                        1. 00 30. 48
              1077
                          MET
      atom
10
                                                     -2.398
                                                                        1. 00 26. 65
                                            43. 550
                                                              -0. 537
                          MET
                                 139
              1078
                     CA
      atom
                                                                0. 293
                                                                        1.00 27.97
                                 139
                                            44. 801
                                                     -2.089
              1079
                     CB
                          MET
      atom
                                                                        1.00 29.19
                                                              -0.152
                                            45. 626
                                                     -0.917
              1080
                     CG
                          MET
                                 139
      atom
                                                               -1.169
                                                                        1. 00 34. 62
                                                     -1.427
                                 139
                                            47. 011
              1081
                     SD
                          MET
      atom
                                                                        1. 00 32. 02
                     CE
                                 139
                                            47. 603
                                                     -2.919
                                                              -0.310
              1082
                          MET
15
      atom
                                                                        1. 00 26. 27
                                                                0. 328
                          MET
                                 139
                                            42. 668
                                                     -3.273
      atom
              1083
                     C
                                            41. 647
                                                     -2.834
                                                                0.852
                                                                        1. 00 26. 36
                          MET
                                 139
              1084
                     0
      atom
                                                                0.480
                                                                        1.00 26.30
                                                     -4.520
              1085
                     N
                          ALA
                                 140
                                            43. 094
      atom
                                                                        1.00 29.53
                                                     -5.484
                                                                1. 319
                                 140
                                            42. 408
                          ALA
      atom
              1086
                     CA
                                            42. 590
                                                     -6.870
                                                                0.763
                                                                        1.00 34.69
                          ALA
                                 140
              1087
                     CB
20
      atom
                                                                        1. 00 33. 12
                                                     -5.374
                                                                2. 677
      atom
              1088
                     C
                          ALA
                                 140
                                            43. 087
                                                                        1.00 34.39
                                            44. 294
                                                     -5. 593
                                                                2. 779
              1089
                          ALA
                                 140
                     0
      atom
                                                                        1. 00 35. 05
              1090
                     N
                          LYS
                                 141
                                            42. 331
                                                     -5.018
                                                                3.716
      atom
                                                                5. 045
                                                                        1. 00 32. 82
                                            42. 923
                                                     -4.883
                          LYS
                                 141
      atom
              1091
                      CA
                                                     -4.202
                                                                6.011
                                                                        1.00 34.61
                     CB
                          LYS
                                 141
                                            41. 940
              1092
25
      atom
                                                     -2. 775
                                                                        1.00 36.26
                                                                6.410
              1093
                      CG
                          LYS
                                 141
                                            42. 343
      atom
                                                                7.678
                                                                        1. 00 46. 84
              1094
                                            41. 601
                                                     -2.310
                      CD
                          LYS
                                 141
      atom
                                            41. 236
                                                     -0.805
                                                                7.655
                                                                        1.00 47.24
               1095
                      CE
                          LYS
                                 141
      atom
                                 141
                                            42. 184
                                                       0.072
                                                                8. 439
                                                                        1. 00 40. 93
               1096
                      NZ
                          LYS
      atom
                                                                5.589
                                                                        1.00 29.67
                                                     -6.242
                                 141
                                            43. 345
               1097
                      C
                          LYS
30
      atom
                                            42. 719
                                                     -7. 260
                                                                5. 303
                                                                        1. 00 29. 80
                          LYS
                                 141
               1098
                      0
      atom
                                                                6.360
                                                                        1. 00 31. 23
                                            44. 425
                                                     -6.256
               1099
                      N
                          ASN
                                 142
      atom
                                                     -7.496
                                                                6.949
                                                                        1. 00 30. 24
                                            44. 923
                          ASN
                                  142
      atom
               1100
                      CA
                                            46. 396
                                                     -7. 706
                                                                6. 591
                                                                        1. 00 33. 52
               1101
                      CB
                          ASN
                                  142
      atom
                                            46. 609
                                                     -8.065
                                                                5. 126
                                                                        1. 00 34. 71
               1102
                      CG
                          ASN
                                  142
      atom
35
                                                                4.817
                                                                        1. 00 38. 81
                                                      -8.991
                      OD1 ASN
                                  142
                                            47. 347
      atom
               1103
```

```
1.00 37.08
                                           45. 977
                                                     -7.330
                                                               4. 225
              1104
                    ND2 ASN
                                 142
      atom
                                                                        1.00 29.20
                                           44. 796
                                                     -7.412
                                                               8. 470
                     C
                          ASN
                                 142
              1105
      atom
                                                                9.126
                                                                        1. 00 29. 53
                                           45. 648
                                                     -6.803
                          ASN
                                 142
      atom
              1106
                     0
                                                                9. 031
                                                                        1. 00 23. 30
                                           43. 734
                                                     -7. 990
      atom
              1107
                     N
                          GLU
                                 143
                                                                        1. 00 21. 14
                                           43. 556
                                                     -7. 979
                                                              10. 483
                          GLU
                                 143
              1108
                     CA
 5
      atom
                                                              10.924
                                                                        1. 00 17. 55
                          GLU
                                 143
                                            42. 520
                                                     -6.945
              1109
                     CB
      atom
                                                              10. 249
                                                                        1. 00 17. 18
                                            41. 199
                                                     -7. 006
                     CG
                          GLU
                                 143
      atom
              1110
                                                                        1. 00 23. 57
                                                              10. 216
                          GLU
                                 143
                                            40. 522
                                                     -5. 652
                     CD
      atom
              1111
                                                                        1. 00 27. 69
                                            41. 225
                                                     -4. 620
                                                              10. 318
              1112
                     OE1 GLU
                                 143
      atom
                                                                        1. 00 30. 88
                                 143
                                            39. 284
                                                    -5. 607
                                                              10. 087
              1113
                     OE2 GLU
      atom
10
                                                               10.890
                                                                        1. 00 17. 20
                                            43. 142
                                                    -9. 368
                     C
                          GLU
                                 143
              1114
      atom
                                                               10.097
                                                                        1. 00 18. 93
                          GLU
                                 143
                                            42. 574 -10. 093
              1115
                     0
      atom
                                                                        1.00 17.94
                                                               12. 121
                                 144
                                            43. 418 -9. 760
              1116
                     N
                          VAL
      atom
                                                               12. 486
                                                                        1. 00 20. 65
                                            43. 092 -11. 126
                          VAL
                                 144
              1117
                     CA
      atom
                                                                        1. 00 20. 49
                          VAL
                                 144
                                            44. 297 -11. 807
                                                               13. 201
              1118
                     CB
15
      atom
                                                                        1. 00 16. 50
                                                               13. 115
                     CG1 VAL
                                 144
                                            45. 518 -10. 910
      atom
              1119
                                            43. 962 -12. 141
                                                               14. 635
                                                                        1. 00 18. 24
                     CG2 VAL
                                 144
              1120
      atom
                                                                        1.00 20.00
                                            41. 812 -11. 342
                                                               13. 263
              1121
                     C
                          VAL
                                 144
      atom
                                                                        1. 00 24. 75
                                            41. 355 -10. 476
                                                               13. 985
                          VAL
                                 144
      atom
              1122
                     0
                                            41. 250 -12. 528
                                                               13.078
                                                                        1. 00 19. 07
                     N
                          PHE
                                 145
              1123
20
      atom
                                                               13. 694
                                                                        1. 00 16. 80
                                            40. 002 -12. 946
      atom
              1124
                     CA
                          PHE
                                 145
                                                                        1. 00 12. 26
                                            38. 850 -12. 777
                                                               12. 687
              1125
                     CB
                          PHE
                                 145
      atom
                                                                        1. 00 15. 43
              1126
                     CG
                          PHE
                                 145
                                            38. 573 -11. 358
                                                               12. 318
      atom
                                                                        1. 00 16. 74
                                            38. 838 -10. 891
                                                               11 022
              1127
                     CD1 PHE
                                 145
      atom
                                            38. 076 -10. 470
                                                               13. 261
                                                                        1. 00 12. 81
                     CD2 PHE
                                 145
              1128
25
      atom
                                                                        1. 00 10. 56
                                                               10.673
              1129
                     CE1 PHE
                                 145
                                            38. 614 -9. 551
      atom
                                                               12. 924
                                                                         1. 00 14. 36
                                                     -9. 117
                     CE2 PHE
                                 145
                                            37. 848
      atom
               1130
                                                               11.624
                                            38. 120 -8. 662
                                                                         1. 00 12. 18
               1131
                      CZ
                          PHE
                                 145
      atom
                                  145
                                            40. 091 -14. 421
                                                               14. 082
                                                                         1. 00 16. 98
               1132
                      C
                          PHE
      atom
                                                                         1. 00 19. 51
                                            41. 146 -15. 058
                                                               13. 975
                                  145
               1133
                      0
                          PHE
30
      atom
                                                                         1.00 15.55
                                            38. 960 -14. 959
                                                               14. 513
               1134
                      N
                          CYS
                                  146
      atom
                                                                         1. 00 19. 61
                                            38. 861 -16. 353
                                                               14. 886
               1135
                      CA
                          CYS
                                  146
      atom
                                                                         1.00 20.46
                                                               16. 325
                                            38. 352 −16. 479
                      CB
                          CYS
                                  146
      atom
               1136
                                            38. 349 -18. 152
                                                               16. 978
                                                                         1. 00 29. 33
               1137
                      SG
                          CYS
                                  146
      atom
                                            37. 826 -16. 887
                                                               13. 918
                                                                         1. 00 22. 54
               1138
                      C
                           CYS
                                  146
      atom
35
                                                               13. 631
                                                                         1. 00 24. 05
                                             36. 852 -16. 197
               1139
                      0
                           CYS
                                  146
      atom
```

```
38. 025 -18. 096
                                                                13. 408
                                                                         1. 00 27. 04
                          VAL
                                  147
              1140
      atom
                     N
                                             37. 070 -18. 648
                                                                12. 462
                                                                          1.00 38.78
              1141
                     CA
                          VAL
                                  147
      atom
                                                                          1. 00 40. 45
                                             37. 428 -20. 088
                                                                12.078
              1142
                     CB
                          VAL
                                  147
      atom
                                                                11. 844
                                                                          1. 00 37. 73
                                             38. 929 -20. 190
                     CG1 VAL
                                  147
      atom
              1143
                                             36. 962 -21. 050
                                                                13. 167
                                                                          1. 00 40. 03
              1144
                     CG2 VAL
                                  147
      atom
 5
                                             35. 668 -18. 609
                                                                13. 046
                                                                          1. 00 42. 25
              1145
                     C
                          VAL
                                  147
      atom
                                                                14. 239
                                                                          1. 00 43. 36
                                  147
                                             35. 485 -18. 844
              1146
                          VAL
      atom
                     0
                                             34. 695 -18. 293
                                                                12. 192
                                                                          1. 00 52. 45
                          GLN
                                  148
              1147
                     N
      atom
                                                                12. 585
                                                                          1. 00 58. 94
              1148
                     CA
                          GLN
                                  148
                                             33. 294 -18. 181
      atom
                                                                          1. 00 62. 76
                                             32. 375 -18. 223
                                                                11. 360
              1149
                     CB
                          GLN
                                  148
10
      atom
                          GLN
                                  148
                                             31. 141 -17. 310
                                                                11. 473
                                                                          1. 00 69. 47
              1150
                      CG
      atom
                                                                10. 120
                                                                          1. 00 72. 76
                          GLN
                                             30. 518 -16. 967
              1151
                      CD
                                  148
      atom
                                                                          1.00 72.30
                                             30. 620 -15. 834
                                                                 9. 644
                      OE1 GLN
                                  148
              1152
      atom
                                                                          1.00 73.42
                      NE2 GLN
                                             29. 866 -17. 949
                                                                 9. 499
              1153
                                  148
      atom
                                                                13. 537
                                                                          1.00 61.80
                                             32. 922 -19. 294
      atom
              1154
                     C
                          GLN
                                  148
15
                                                                13. 338
                                                                          1. 00 61. 76
                                             33. 311 -20. 447
               1155
                          GLN
                                  148
      atom
                      0
              1156
                      N
                           PR0
                                  149
                                             32. 157 -18. 956
                                                                14. 591
                                                                          1. 00 63. 58
      atom
                                             31 641 -17 602
                                                                14. 865
                                                                          1. 00 63. 75
               1157
                      CD
                           PR<sub>0</sub>
                                  149
      atom
                                  149
                                             31. 717 -19. 920
                                                                15. 606
                                                                          1. 00 64. 07
               1158
                      CA
                           PR<sub>0</sub>
      atom
                                                                          1.00 64.66
                                             30. 373 -19. 359
                                                                16.072
               1159
                      CB
                           PR<sub>0</sub>
                                  149
20
      atom
                                                                15. 711
                                                                          1. 00 65. 09
               1160
                           PR<sub>0</sub>
                                  149
                                             30. 410 -17. 863
                      CG
      atom
                                  149
                                             31. 577 -21. 294
                                                                14.983
                                                                          1. 00 64. 02
               1161
                      C
                           PR0
      atom
                                                                15. 381
                                                                          1. 00 60. 51
                                             32. 248 -22. 251
      atom
               1162
                      0
                           PR0
                                  149
                                  150
                                             30. 702 -21. 356
                                                                13. 983
                                                                          1.00 64.24
               1163
                      N
                           GLU
      atom
                                             30. 440 -22. 576
                                                                13. 243
                                                                          1. 00 65. 65
               1164
                      CA
                          GLU
                                  150
      atom
25
                                                                          1. 00 64. 12
                                             29. 245 -22. 375
                                                                12. 308
               1165
                      CB
                           GLU
                                  150
      atom
                                             28. 904 -20. 909
                                                                12.036
                                                                          1.00 65.02
                          GLU
                                  150
               1166
                      CG
      atom
                                                                12. 510
                                                                          1. 00 65. 10
               1167
                      CD
                          GLU
                                  150
                                             27. 507 -20. 534
      atom
                                             26. 913 -21. 330
                                                                13. 273
                                                                          1. 00 61. 66
               1168
                      OE1 GLU
                                  150
      atom
                      0E2 GLU
                                  150
                                             27. 007 -19. 449
                                                                12. 123
                                                                          1. 00 62. 67
               1169
      atom
30
                                             31. 688 -22. 911
                                                                12. 430
                                                                          1. 00 67. 55
               1170
                      C
                           GLU
                                  150
      atom
                                                                11. 726
                                                                          1.00 68.49
                                             32. 228 -22. 046
               1171
                      0
                           GLU
                                  150
      atom
                                             32. 146 -24. 159
                                                                12. 543
                                                                          1. 00 66. 38
               1172
                           LYS
                                  151
                      N
      atom
                                                                11. 818
                                                                          1.00 63.34
               1173
                      CA
                           LYS
                                  151
                                             33. 328 -24. 620
       atom
                                             33. 522 -26. 135
                                                                12. 006
                                                                          1. 00 62. 68
       atom
               1174
                      CB
                           LYS
                                  151
35
                                             34. 936 -26. 532
                                                                12. 446
                                                                          1. 00 61. 87
               1175
                      CG
                           LYS
                                  151
       atom
```

	atom	1176	CD	LYS	151	35. 330 -27. 903	11. 918	1. 00 62. 09
	atom	1177	CE	LYS	151	36. 406 -27. 813	10. 847	1. 00 59. 59
	atom	1178	NZ	LYS	151	36. 715 -29. 162	10. 279	1. 00 57. 99
	atom	1179	С	LYS	151	33. 213 -24. 282	10. 330	1. 00 60. 40
5	atom	1180	0	LYS	151	32. 533 -24. 966	9. 559	1. 00 59. 04
	atom	1181	N	GLY	152	33. 889 -23. 208	9. 943	1. 00 57. 56
	atom	1182	CA	GLY	152	33. 862 -22. 772	8. 565	1. 00 51. 32
	atom	1183	С	GLY	152	33. 977 -21. 269	8. 492	1. 00 45. 79
	atom	1184	0	GLY	152	35. 070 -20. 725	8. 638	1. 00 45. 11
10	atom	1185	N	GLY	153	32. 841 -20. 611	8. 280	1. 00 42. 64
	atom	1186	CA	GLY	153	32. 798 -19. 163	8. 173	1. 00 40. 81
	atom	1187	С	GLY	153	34. 094 -18. 404	8. 402	1. 00 38. 58
	atom	1188	0	GLY	153	34. 712 -18. 507	9. 461	1. 00 38. 72
	atom	1189	N	ARG	154	34. 499 -17. 632	7. 399	1. 00 35. 69
15	atom	1190	CA	ARG	154	35. 709 -16. 820	7. 472	1. 00 33. 89
	atom	1191	CB	ARG	154	36. 839 -17. 486	6. 677	1. 00 37. 54
	atom	1192	CG	ARG	154	38. 090 -17. 857	7. 489	1. 00 34. 13
	atom	1193	CD	ARG	154	39. 211 -18. 305	6. 554	1. 00 32. 60
	atom	1194	NE	ARG	154	40. 342 -18. 930	7. 236	1. 00 28. 80
20	atom	1195	CZ	ARG	154	40. 262 -20. 030	7. 974	1. 00 28. 75
	atom	1196	NH1	ARG	154	39. 091 -20. 644	8. 138	1. 00 25. 45
	atom	1197	NH2	ARG	154	41. 365 -20. 523	8. 532	1. 00 22. 79
	atom	1198	C	ARG	154	35. 349 -15. 472	6. 853	1. 00 32. 85
	atom	1199	0	ARG	154	34. 777 -15. 417	5. 765	1. 00 36. 37
25	atom	1200	N	LYS	155	35. 666 −14. 386	7. 539	1. 00 27. 50
	atom	1201	CA	LYS	155	35. 334 −13. 073	7. 026	1. 00 28. 54
	atom	1202	CB	LYS	155	35. 253 −12. 071	8. 178	1. 00 31. 26
	atom	1203	CG	LYS	155	33. 956 -12. 101	8. 960	1. 00 40. 17
	atom	1204	CD	LYS	155	34. 057 −12. 968	10. 230	1. 00 43. 63
3 0	atom	1205	CE	LYS	155	33. 901 -12. 123	11. 498	1. 00 43. 66
	atom	1206	NZ	LYS	155	34. 164 −10. 671	11. 242	1. 00 44. 91
	atom	1207	C	LYS	155	36. 328 -12. 560	5. 984	1. 00 32. 85
	atom	1208	0	LYS	155	37. 554 -12. 615	6. 177	1. 00 33. 24
	atom	1209	N	PR0	156	35. 816 -12. 093	4. 839	1. 00 29. 41
3 5	atom	1210	CD	PR0	156	34. 400 -12. 109	4. 434	1. 00 31. 41
	atom	1211	CA	PR0	156	36. 694 -11. 569	3. 794	1. 00 26. 76

	atom	1212	CB	PR0	156	35. 775 -	11. 421	2. 582	1. 00 32. 64
	atom	1213	CG	PR0	156	34. 395 -	11. 332	3. 151	1. 00 33. 94
	atom	1214	C	PR0	156	37. 264 -	10. 228	4. 222	1. 00 21. 47
	atom	1215	0	PR0	156	36. 611	-9. 493	4. 941	1. 00 15. 73
5 ,	atom	1216	N	ALA	157	38. 465	-9. 908	3. 752	1. 00 19. 11
	atom	1217	CA	ALA	157	39. 114	-8. 658	4. 095	1. 00 23. 05
	atom	1218	CB	ALA	157	40. 338	-8. 452	3. 232	1. 00 20. 61
	atom	1219	С	ALA	157	38. 213	-7. 442	3. 988	1. 00 27. 93
	atom	1220	0	ALA	157	37. 155	-7. 481	3. 380	1. 00 31. 73
10	atom	1221	N	ARG	158	38. 661	-6. 359	4. 608	1. 00 31. 17
	atom	1222	CA	ARG	158	37. 966	-5. 090	4. 596	1. 00 30. 61
	atom	1223	CB	ARG	158	38. 108	-4. 402	5. 953	1. 00 39. 25
	atom	1224	CG	ARG	158	36. 921	-4. 522	6. 895	1. 00 46. 67
	atom	1225	CD	ARG	158	36. 243	-3. 165	7. 074	1. 00 56. 19
15	atom	1226	NE	ARG	158	36. 734	-2. 328	8. 184	1. 00 62. 33
	atom	1227	CZ	ARG	158	37. 968	-2. 314	8. 699	1. 00 65. 03
	atom	1228	NH1	ARG	158	38. 921	-3. 111	8. 238	1. 00 62. 19
	atom	1229	NH2	ARG	158	38. 252	-1. 462	9. 683	1. 00 66. 14
	atom	1230	C	ARG	158	38. 729	-4. 291	3. 555	1. 00 30. 37
2 0	atom	1231	0	ARG	158	39. 953	-4. 405	3. 468	1. 00 30. 08
	atom	1232	N	LEU	159	38. 033	-3. 478	2. 771	1. 00 28. 48
	atom	1233	CA	LEU	159	38. 720	-2. 704	1. 758	1. 00 26. 77
	atom	1234	CB	LEU	159	37. 950	-2. 748	0. 440	1. 00 25. 42
	atom	1235	CG	LEU	159	37. 459	-4. 091	-0. 085	1. 00 28. 81
25	atom	1236	CD1	LEU	159	37. 558	-4. 057	-1. 589	1. 00 26. 63
	atom	1237	CD2	LEU	159	38. 260	-5. 249	0. 496	1. 00 25. 80
	atom	1238	С	LEU	159	38. 895	-1. 259	2. 160	1. 00 25. 74
	atom	1239	0	LEU	159	37. 904	-0. 526	2. 245	1. 00 28. 64
	atom	1240	N	ILE	160	40. 132	-0. 839	2. 419	1. 00 22. 24
3 0	atom	1241	CA	ILE	160	40. 351	0. 559	2. 759	1. 00 19. 95
	atom	1242	CB	ILE	160	41. 538	0. 755	3. 759	1. 00 24. 51
	atom	1243	CG2	ILE	160	42. 848	0. 394	3. 120	1. 00 24. 22
	atom	1244	CG1	ILE	160	41. 594	2. 222	4. 228	1. 00 33. 48
	atom	1245	CD1	ILE	160	41. 084	2. 491	5. 672	1. 00 30. 14
3 5	atom	1246	С	ILE	160	40. 566	1. 354	1. 465	1. 00 20. 39
	atom	1247	0	ILE	160	40. 938	0. 813	0. 417	1. 00 23. 89

	atom	1248	N	VAL	161	40. 270	2. 640	1. 530	1. 00 20. 34
	atom	1249	CA	VAL	161	40. 392	3. 513	0. 384	1. 00 13. 51
	atom	1250	СВ	VAL	161	39. 002	3. 776	-0. 226	1. 00 17. 37
	atom	1251	CG1	VAL	161	39. 122	4. 782	-1. 383	1. 00 15. 61
5	atom	1252	CG2	VAL	161	38. 377	2. 453	-0. 686	1. 00 11. 77
	atom	1253	С	VAL	161	40. 958	4. 821	0. 903	1. 00 16. 32
	atom	1254	0	VAL	161	40. 330	5. 469	1. 725	1. 00 13. 98
	atom	1255	N	PHE	162	42. 135	5. 215	0. 432	1. 00 18. 09
	atom	1256	CA	PHE	162	42. 738	6. 456	0. 913	1. 00 19. 73
10	atom	1257	CB	PHE	162	43. 746	6. 135	2. 000	1. 00 19. 06
	atom	1258	CG	PHE	162	44. 793	5. 155	1. 569	1. 00 23. 11
	atom	1259	CD1	PHE	162	46. 062	5. 595	1. 188	1. 00 24. 58
	atom	1260	CD2	PHE	162	44. 524	3. 792	1. 557	1. 00 19. 16
	atom	1261	CE1	PHE	162	47. 036	4. 691	0. 813	1. 00 19. 74
15	atom	1262	CE2	PHE	162	45. 498	2. 878	1. 182	1. 00 18. 01
	atom	1263	CZ	PHE	162	46. 759	3. 330	0. 810	1. 00 18. 62
	atom	1264	C	PHE	162	43. 450	7. 247	-0. 177	1. 00 18. 75
	atom	1265	0	PHE	162	44. 021	6. 665	-1. 092	1. 00 13. 27
	atom	1266	N	PR0	163	43. 438	8. 591	-0. 072	1. 00 19. 79
20	atom	1267	CD	PR0	163	42. 825	9. 385	1. 011	1. 00 20. 08
	atom	1268	CA	PR0	163	44. 099	9. 451	-1. 062	1. 00 18. 01
	atom	1269	CB	PR0	163	43. 549	10. 845	-0. 754	1. 00 14. 92
	atom	1270	CG	PRO	163	43. 317	10. 820	0. 718	1. 00 13. 92
	atom	1271	С	PRO	163	45. 617	9. 368	-0. 851	1. 00 22. 20
25	atom	1272	0	PR0	163	46. 119	8. 424	-0. 228	1. 00 24. 81
	atom	1273	N	ASP	164	46. 344	10. 352	-1. 364	1. 00 22. 65
	atom	1274	CA	ASP	164	47. 798	10. 363		1. 00 22. 44
	atom	1275	СВ	ASP	164	48. 437	10. 919		1. 00 21. 02
	atom	1276	CG	ASP	164	49. 979	10. 885		1. 00 25. 45
3 0	atom	1277		ASP	164	50. 596	11. 960	-2. 340	1. 00 26. 87
	atom	1278		ASP	164	50. 578	9. 796	-2. 698	1. 00 23. 16
	atom	1279	C	ASP	164	48. 189	11. 214	-0. 020	1. 00 21. 82
	atom	1280	0	ASP	164	47. 461	12. 134	0. 369	1. 00 11. 22
	atom	1281	N	LEU	165	49. 339	10. 878		1. 00 23. 17
3 5	atom	1282	CA	LEU	165	49. 901	11. 567		1. 00 24. 29
	atom	1283	CB	LEU	165	51. 404	11. 245	1. 797	1. 00 27. 89

	atom	1284	CG	LEU	165	52. 245	11. 796	2. 960	1. 00 27. 55
	atom	1285	CD1		165	51. 470	11. 627	4. 263	1. 00 29. 58
	atom	1286	CD2		165	53. 579	11. 080	3. 035	1. 00 23. 53
	atom	1287	C	LEU	165	49. 700	13. 085	1. 641	1. 00 27. 92
5	atom	1288	0	LEU	165	49. 280	13. 739	2. 618	1. 00 26. 93
,	atom	1289	N	GLY	166	50. 015	13. 650	0. 484	1. 00 25. 18
	atom	1290	CA	GLY	166	49. 863	15. 083	0. 324	1. 00 24. 97
	atom	1291	C	GLY	166	48. 428	15. 546	0. 471	1. 00 22. 31
	atom	1292	0	GLY	166	48. 161	16. 659	0. 938	1. 00 23. 62
10	atom	1293	N	VAL	167	47. 495	14. 710	0. 043	1. 00 18. 72
_ `	atom	1294	CA	VAL	167	46. 099	15. 076	0. 183	1. 00 22. 92
	atom	1295	СВ	VAL	167	45. 155	14. 096	-0. 579	1. 00 23. 81
	atom	1296	CG1	VAL	167	43. 712	14. 344	-0. 172	1. 00 17. 63
	atom	1297		VAL	167	45. 303	14. 306	-2. 082	1. 00 17. 07
15	atom	1298	С	VAL	167	45. 834	15. 030	1. 679	1. 00 20. 19
	atom	1299	0	VAL	167	45. 316	15. 988	2. 251	1. 00 25. 41
	atom	1300	N	ARG	168	46. 226	13. 926	2. 306	1. 00 17. 47
	atom	1301	CA	ARG	168	46. 071	13. 747	3. 748	1. 00 20. 66
	atom	1302	CB	ARG	168	46. 768	12. 442	4. 184	1. 00 12. 74
20	atom	1303	CG	ARG	168	45. 786	11. 303	4. 520	1. 00 14. 91
	atom	1304	CD	ARG	168	46. 288	9. 924	4. 153	1. 00 5. 34
	atom	1305	NE	ARG	168	47. 737	9. 836	4. 279	1. 00 20. 08
	atom	1306	CZ	ARG	168	48. 510	8. 981	3. 616	1. 00 19. 67
	atom	1307	NH1	ARG	168	49. 826	8. 993	3. 812	1. 00 21. 17
25	atom	1308	NH2	ARG	168	47. 974	8. 112	2. 771	1. 00 12. 86
	atom	1309	С	ARG	168	46. 599	14. 957	4. 564	1. 00 21. 32
	atom	1310	0	ARG	168	45. 901	15. 482	5. 429	1. 00 25. 92
	atom	1311	N	VAL	169	47. 814	15. 417	4. 297	1. 00 20. 48
	atom	1312	CA	VAL	169	48. 307	16. 562	5. 048	1. 00 20. 77
3 0	atom	1313	CB	VAL	169	49. 737	17. 006	4. 587	1. 00 17. 98
	atom	1314	CG1	VAL	169	50. 085	18. 381	5. 158	1. 00 16. 60
	atom	1315	CG2	VAL	169	50. 753	15. 998	5. 043	1. 00 18. 11
	atom	1316	C	VAL	169	47. 335	17. 708	4. 813	1. 00 21. 18
	atom	1317	0	VAL	169	47. 006	18. 459	5. 732	1. 00 24. 32
3 5	atom	1318	N	CYS	170	46. 865	17. 843	3. 578	1. 00 25. 10
	atom	1319	CA	CYS	170	45. 930	18. 919	3. 249	1. 00 24. 67

		1200	CD.	cvc	170	AE 711	19. 002	1. 730	1. 00 27. 71
	atom	1320	CB	CYS	170	45. 744		0. 869	1. 00 27. 71
	atom	1321	SG	CYS	170	47. 076	19. 909		1. 00 27. 34
	atom	1322	C	CYS	170	44. 584	18. 731	3. 955	
	atom	1323	0	CYS	170	43. 966	19. 705	4. 416	1. 00 21. 66
5	atom	1324	N	GLU	171	44. 137	17. 481	4. 057	1. 00 18. 43
	atom	1325	CA	GLU	171	42. 875	17. 216	4. 736	1. 00 18. 04
	atom	1326	СВ	GLU	171	42. 587	15. 699	4. 835	1. 00 8. 34
	atom	1327	CG	GLU	171	42. 052	15. 108	3. 509	1. 00 2. 27
	atom	1328	CD	GLU	171	41. 409	13. 717	3. 626	1. 00 8. 05
10	atom	1329	0E1	GLU	171	42. 129	12. 702	3. 652	1. 00 5. 15
	atom	1330	0E2	GLU	171	40. 166	13. 633	3. 672	1. 00 9. 40
	atom	1331	С	GLU	171	43. 049	17. 836	6. 106	1. 00 19. 14
	atom	1332	0	GLU	171	42. 212	18. 637	6. 532	1. 00 14. 20
	atom	1333	N	LYS	172	44. 170	17. 514	6. 764	1. 00 18. 46
15	atom	1334	CA	LYS	172	44. 446	18. 034	8. 107	1. 00 16. 81
	atom	1335	CB	LYS	172	45. 820	17. 586	8. 604	1. 00 18. 96
	atom	1336	CG	LYS	172	45. 843	16. 234	9. 300	1. 00 17. 24
	atom	1337	CD	LYS	172	46. 653	15. 237	8. 517	1. 00 17. 70
	atom	1338	CE	LYS	172	47. 112	14. 111	9. 391	1. 00 20. 07
20	atom	1339	NZ	LYS	172	46. 802	12. 772	8. 798	1. 00 21. 38
	atom	1340	С	LYS	172	44. 391	19. 550	8. 146	1. 00 17. 84
	atom	1341	0	LYS	172	43. 719	20. 131	8. 989	1. 00 19. 49
	atom	1342	N	MET	173	45. 094	20. 200	7. 236	1. 00 18. 73
	atom	1343	CA	MET	173	45. 092	21. 649	7. 252	1. 00 25. 13
25	atom	1344	CB	MET	173	45. 825	22. 200	6. 025	1. 00 24. 15
	atom	1345	CG	MET	173	47. 353	22. 055	6. 141	1. 00 32. 87
	atom	1346	SD	MET	173	48. 276	22. 321	4. 610	1. 00 32. 61
	atom	1347	CE	MET	173	48. 568	24. 104	4. 677	1. 00 29. 59
	atom	1348	С	MET	173	43. 682	22. 218	7. 330	1. 00 26. 29
3 0	atom	1349	0	MET	173	43. 358	22. 984	8. 239	1. 00 25. 83
	atom	1350	N	ALA	174	42. 826	21. 814	6. 404	1. 00 25. 93
	atom	1351	CA	ALA	174	41. 475	22. 348	6. 378	1. 00 22. 87
	atom	1352	СВ	ALA	174	41. 007	22. 419	4. 946	1. 00 28. 71
	atom	1353	С	ALA	174	40. 400	21. 648	7. 208	1. 00 23. 81
3 5	atom	1354	0	ALA	174	39. 341	22. 212	7. 426	1. 00 28. 91
	atom	1355	N	LEU	175	40. 637	20. 447	7. 699	1. 00 20. 65

	atom	1356	CA	LEU	175	39. 548	19. 799	8. 398	1. 00 20. 65
	atom	1357	CB	LEU	175	39. 014	18. 672	7. 509	1. 00 16. 61
	atom	1358	CG	LEU	175	38. 022	19. 194	6. 474	1. 00 18. 52
	atom	1359	CD1	LEU	175	37. 617	18. 080	5. 514	1. 00 25. 09
5	atom	1360	CD2	LEU	175	36. 826	19. 748	7. 185	1. 00 12. 35
	atom	1361	C	LEU	175	39. 764	19. 279	9. 809	1. 00 21. 36
	atom	1362	0	LEU	175	38. 785	19. 044	10. 536	1. 00 21. 56
	atom	1363	N	TYR	176	41. 024	19. 106	10. 199	1. 00 21. 79
	atom	1364	CA	TYR	176	41. 330	18. 590	11. 521	1. 00 24. 37
10	atom	1365	CB	TYR	176	42. 823	18. 702	11. 801	1. 00 27. 38
	atom	1366	CG	TYR	176	43. 200	18. 138	13. 149	1. 00 26. 58
	atom	1367	CD1	TYR	176	43. 467	16. 780	13. 304	1. 00 18. 36
	atom	1368	CE1	TYR	176	43. 778	16. 245	14. 541	1. 00 15. 60
	atom	1369	CD2	TYR	176	43. 255	18. 959	14. 276	1. 00 22. 63
15	atom	1370	CE2	TYR	176	43. 563	18. 438	15. 520	1. 00 22. 17
	atom	1371	CZ	TYR	176	43. 825	17. 081	15. 652	1. 00 21. 81
	atom	1372	OH	TYR	176	44. 135	16. 572	16. 897	1. 00 24. 09
	atom	1373	C	TYR	176	40. 544	19. 281	12. 639	1. 00 23. 42
	atom	1374	0	TYR	176	39. 834	18. 617	13. 401	1. 00 24. 86
20	atom	1375	N	ASP	177	40. 667	20. 602	12. 725	1. 00 19. 86
	atom	1376	CA	ASP	177	39. 973	21. 381	13. 751	1. 00 24. 18
	atom	1377	CB	ASP	177	40. 235	22. 895	13. 584	1. 00 24. 04
	atom	1378	CG	ASP	177	39. 836	23. 720	14. 830	1. 00 28. 43
	atom	1379	0D1	ASP	177	39. 646	24. 954	14. 698	1. 00 25. 72
25	atom	1380	0D2	ASP	177	39. 723	23. 142	15. 940	1. 00 30. 12
	atom	1381	C	ASP	177	38. 480	21. 121	13. 689	1. 00 23. 39
	atom	1382	0	ASP	177	37. 858	20. 791	14. 701	1. 00 18. 65
	atom	1383	N	VAL	178	37. 925	21. 278	12. 490	1. 00 26. 00
	atom	1384	CA	VAL	178	36. 503	21. 068	12. 241	1. 00 22. 90
3 0	atom	1385	CB	VAL	178	36. 187	21. 206	10. 734	1. 00 24. 09
	atom	1386	CG1	VAL	178	34. 742	20. 761	10. 447	1. 00 21. 97
	atom	1387	CG2	VAL	178	36. 420	22. 642	10. 287	1. 00 18. 09
	atom	1388	С	VAL	178	36. 090	19. 673	12. 666	1. 00 22. 07
	atom	1389	0	VAL	178	35. 087	19. 485	13. 325	1. 00 22. 18
3 5	atom	1390	N	VAL	179	36. 896	18. 699	12. 278	1. 00 21. 01
	atom	1391	CA	VAL	179	36. 624	17. 296	12. 538	1. 00 19. 30

	atom	1392	СВ	VAL	179	37. 459	16. 452	11. 506	1. 00 17. 27
	atom	1393	CG1	VAL	179	37. 942	15. 161	12. 075	1. 00 15. 59
	atom	1394	CG2	VAL	179	36. 626	16. 198	10. 280	1. 00 5. 32
	atom	1395	С	VAL	179	36. 830	16. 836	13. 993	1. 00 23. 09
5	atom	1396	0	VAL	179	36. 416	15. 729	14. 372	1. 00 24. 82
	atom	1397	N	SER	180	37. 438	17. 676	14. 821	1. 00 20. 55
	atom	1398	CA	SER	180	37. 638	17. 306	16. 217	1. 00 19. 50
	atom	1399	CB	SER	180	39. 123	17. 268	16. 562	1. 00 17. 45
	atom	1400	0G	SER	180	39. 768	18. 460	16. 176	1. 00 18. 00
10	atom	1401	C	SER	180	36. 939	18. 278	17. 147	1. 00 22. 13
	atom	1402	0	SER	180	37. 040	18. 166	18. 366	1. 00 23. 67
	atom	1403	N	THR	181	36. 211	19. 225	16. 570	1. 00 22. 08
	atom	1404	CA	THR	181	35. 522	20. 224	17. 361	1. 00 24. 72
	atom	1405	CB	THR	181	36. 063	21. 648	17. 058	1. 00 29. 04
15	atom	1406	0G1	THR	181	37. 417	21. 764	17. 521	1. 00 31. 21
	atom	1407	CG2	THR	181	35. 222	22. 697	17. 754	1. 00 34. 02
	atom	1408	C	THR	181	34. 024	20. 230	17. 141	1. 00 23. 96
	atom	1409	0	THR	181	33. 257	20. 222	18. 101	1. 00 25. 10
	atom	1410	N	LEU	182	33. 614	20. 211	15. 878	1. 00 22. 24
20	atom	1411	CA	LEU	182	32. 194	20. 278	15. 517	1. 00 20. 03
	atom	1412	CB	LEU	182	32. 080	20. 533	14. 006	1. 00 16. 49
	atom	1413	CG	LEU	182	30. 764	20. 247	13. 288	1. 00 13. 61
	atom	1414	CD1	LEU	182	30. 473	21. 285	12. 231	1. 00 10. 62
	atom	1415	CD2	LEU	182	30. 871	18. 883	12. 672	1. 00 18. 21
25	atom	1416	C	LEU	182	31. 239	19. 156	15. 932	1. 00 18. 70
	atom	1417	0	LEU	182	30. 076		16. 246	1. 00 17. 38
	atom	1418	N	PR0	183	31. 705	17. 902	15. 949	1. 00 24. 20
	atom	1419	CD	PR0	183	33. 041	17. 389	15. 603	1. 00 21. 52
	atom	1420	CA	PR0	183	30. 778	16. 824	16. 345	1. 00 25. 01
3 0	atom	1421	CB	PR0	183	31. 625	15. 555	16. 259	1. 00 24. 26
	atom	1422	CG	PR0	183	32. 766	15. 923	15. 337	1. 00 27. 42
	atom	1423	C	PR0	183	30. 150	16. 988	17. 727	1. 00 27. 49
	atom	1424	0	PR0	183	28. 938	16. 860	17. 890	1. 00 25. 95
	atom	1425	N	GLN	184	30. 975	17. 274	18. 722	1. 00 28. 58
3 5	atom	1426	CA	GLN	184	30. 464	17. 428	20. 075	1. 00 29. 48
	atom	1427	CB	GLN	184	31. 605	17. 736	21. 046	1. 00 32. 11

	atom	1428	CG	GLN	184	31. 533	16. 935	22. 326	1. 00 43. 59
	atom	1429	CD	GLN	184	32. 132	17.669	23. 513	1. 00 52. 97
	atom	1430	0E1	GLN	184	33. 004	17. 143	24. 207	1. 00 54. 15
	atom	1431	NE2	GLN	184	31. 668	18. 893	23. 750	1. 00 56. 44
5	atom	1432	C	GLN	184	29. 413	18. 517	20. 162	1. 00 26. 07
	atom	1433	0	GLN	184	28. 370	18. 341	20. 794	1. 00 26. 07
	atom	1434	N	VAL	185	29. 682	19. 643	19. 517	1. 00 22. 55
	atom	1435	CA	VAL	185	28. 755	20. 756	19. 561	1. 00 17. 75
	atom	1436	CB	VAL	185	29. 354	22. 045	18. 958	1. 00 14. 40
10	atom	1437	CG1	VAL	185	28. 388	23. 213	19. 202	1. 00 9. 26
	atom	1438	CG2	VAL	185	30. 709	22. 336	19. 568	1. 00 2. 00
	atom	1439	C	VAL	185	27. 466	20. 447	18. 828	1. 00 19. 34
	atom	1440	0	VAL	185	26. 400	20. 866	19. 260	1. 00 25. 62
	atom	1441	N	VAL	186	27. 548	19. 715	17. 730	1. 00 15. 24
15	atom	1442	CA	VAL	186	26. 333	19. 398	16. 993	1. 00 14. 51
	atom	1443	CB	VAL	186	26. 635	18. 907	15. 525	1. 00 16. 42
	atom	1444	CG1	VAL	186	25. 339	18. 383	14. 877	1. 00 4. 47
	atom	1445	CG2	VAL	186	27. 261	20. 044	14. 680	1. 00 8. 35
	atom	1446	С	VAL	186	25. 513	18. 309	17. 680	1. 00 15. 94
20	atom	1447	0	VAL	186	24. 304	18. 431	17. 851	1. 00 17. 63
	atom	1448	N	MET	187	26. 176	17. 238	18. 087	1. 00 18. 70
	atom	1449	CA	MET	187	25. 467	16. 117	18. 674	1. 00 17. 25
	atom	1450	CB	MET	187	26. 079	14. 814	18. 119	1. 00 18. 33
	atom	1451	CG	MET	187	25. 890	14. 700	16. 581	1. 00 13. 46
25	atom	1452	SD	MET	187	26. 973	13. 526	15. 676	1. 00 20. 52
	atom	1453	CE	MET	187	26. 373	12. 004	16. 291	1. 00 20. 96
	atom	1454	С	MET	187	25. 333	16. 074	20. 191	1. 00 17. 46
	atom	1455	0	MET	187	24. 592	15. 251	20. 718	1. 00 20. 33
	atom	1456	N	GLY	188	26. 029	16. 956	20. 895	1. 00 17. 70
3 0	atom	1457	CA	GLY	188	25. 928	16. 966	22. 347	1. 00 18. 64
	atom	1458	C	GLY	188	26. 339	15. 677	23. 049	1. 00 19. 86
	atom	1459	0	GLY	188	27. 277	14. 994	22. 613	1. 00 18. 30
	atom	1460	N	SER	189	25. 624	15. 327	24. 118	1. 00 13. 87
	atom	1461	CA	SER	189	25. 952	14. 128	24. 893	1. 00 17. 42
3 5	atom	1462	CB	SER	189	25. 061	13. 992	26. 145	1. 00 12. 03
	atom	1463	0G	SER	189	23. 696	14. 207	25. 843	1. 00 18. 25

	atom	1464	С	SER	189	25. 862	12. 863	24. 089	1. 00 16. 25
	atom	1465	0	SER	189	26. 330	11. 825	24. 524	1. 00 15. 99
	atom	1466	N	SER	190	25. 252	12. 957	22. 911	1. 00 17. 69
	atom	1467	CA	SER	190	25. 117	11. 812	22. 026	1. 00 13. 15
5	atom	1468	СВ	SER	190	24. 036	12. 104	20. 984	1. 00 14. 83
	atom	1469	0G	SER	190	22. 736	11. 995	21. 536	1. 00 17. 43
	atom	1470	C	SER	190	26. 445	11. 462	21. 310	1. 00 15. 44
	atom	1471	0	SER	190	26. 555	10. 387	20. 703	1. 00 19. 87
	atom	1472	N	TYR	191	27. 441	12. 349	21. 365	1. 00 7. 89
10	atom	1473	CA	TYR	191	28. 720	12. 080	20. 699	1. 00 11. 45
	atom	1474	CB	TYR	191	29. 500	13. 371	20. 479	1. 00 4. 60
	atom	1475	CG	TYR	191	30. 682	13. 211	19. 570	1. 00 8. 04
	atom	1476	CD1	TYR	191	30. 591	12. 470	18. 392	1. 00 17. 37
	atom	1477	CE1	TYR	191	31. 698	12. 339	17. 525	1. 00 15. 08
15	atom	1478	CD2	TYR	191	31. 905	13. 815	19. 868	1. 00 11. 56
	atom	1479	CE2	TYR	191	33. 006	13. 693	19. 016	1. 00 10. 55
	atom	1480	CZ	TYR	191	32. 899	12. 960	17. 846	1. 00 17. 72
	atom	1481	OH	TYR	191	33. 980	12. 878	16. 993	1. 00 17. 02
	atom	1482	C	TYR	191	29. 614	11. 086	21. 438	1. 00 13. 99
20	atom	1483	0	TYR	191	30. 417	11. 468	22. 281	1. 00 15. 45
	atom	. 1484	N	GLY	192	29. 486	9. 810	21. 091	1. 00 16. 18
	atom	1485	CA	GLY	192	30. 271	8. 772	21. 728	1. 00 11. 25
	atom	1486	С	GLY	192	31. 754	9. 007	21. 985	1. 00 16. 97
	atom	1487	0	GLY	192	32. 189	8. 813	23. 105	1. 00 18. 14
25	atom	1488	N	PHE	193	32. 538	9. 431	20. 990	1. 00 17. 05
	atom	1489	CA	PHE	193	33. 985	9. 596	21. 202	1. 00 15. 36
	atom	1490	CB	PHE	193	34. 702	9. 845	19. 863	1. 00 9. 63
	atom	1491	CG	PHE	193	34. 471	8. 749	18. 841	1. 00 12. 30
	atom	1492	CD1		193	33. 799	9. 024	17. 636	1. 00 9. 68
3 0	atom	1493		PHE	193	34. 826	7. 423	19. 129	1. 00 6. 80
	atom	1494	CE1		193	33. 472	7. 995	16. 736	1. 00 6. 25
	atom	1495		PHE	193	34. 510	6. 377	18. 248	1. 00 12. 36
	atom	1496	CZ	PHE	193	33. 827	6. 655	17. 045	1. 00 6. 66
	atom	1497	С	PHE	193	34. 438	10. 622	22. 245	1. 00 16. 34
3 5	atom	1498	0	PHE	193	35. 632	10. 764	22. 508	1. 00 17. 70
	atom	1499	N	GLN	194	33. 505	11. 338	22. 844	1. 00 13. 56

	atom	1500	CA	GLN	194	33. 881	12. 299	23. 871	1. 00 15. 20
	atom	1501	СВ	GLN	194	32. 825	13. 400	23. 988	1. 00 12. 23
	atom	1502	CG	GLN	194	31. 573	12. 947	24. 708	1. 00 6. 84
	atom	1503	CD	GLN	194	30. 473	13. 965	24. 645	1. 00 8. 12
5	atom	1504	0E1	GLN	194	30. 645	15. 117	25. 055	1. 00 15. 59
,	atom	1505	NE2		194	29. 331	13. 555	24. 129	1. 00 8. 58
	atom	1506	C	GLN	194	33. 973	11. 547	25. 209	1. 00 18. 89
	atom	1507	0	GLN	194	34. 481	12. 086	26. 203	1. 00 15. 22
	atom	1508	N	TYR	195	33. 492	10. 298	25. 210	1. 00 14. 89
10	atom	1509	CA	TYR	195	33. 467	9. 479	26. 407	1. 00 11. 78
- 0	atom	1510	СВ	TYR	195	32. 137	8. 731	26. 484	1. 00 10. 12
	atom	1511	CG	TYR	195	30. 923	9. 639	26. 603	1. 00 7. 64
	atom	1512	CD1	TYR	195	29. 791	9. 409	25. 835	1. 00 6. 64
	atom	1513	CE1	TYR	195	28. 684	10. 240	25. 913	1. 00 9. 04
15	atom	1514		TYR	195	30. 914	10. 744	27. 475	1. 00 10. 79
	atom	1515	CE2	TYR	195	29. 802	11. 587	27. 562	1. 00 3. 29
	atom	1516	CZ	TYR	195	28. 691	11. 324	26. 774	1. 00 8. 40
	atom	1517	ОН	TYR	195	27. 584	12. 144	26. 797	1. 00 10. 79
	atom	1518	С	TYR	195	34. 603	8. 494	26. 562	1. 00 15. 50
2 0	atom	1519	0	TYR	195	35. 006	7. 854	25. 600	1. 00 17. 27
	atom	1520	N	SER	196	35. 139	8. 395	27. 778	1. 00 17. 84
	atom	1521	CA	SER	196	36. 213	7. 441	28. 071	1. 00 17. 44
	atom	1522	CB	SER	196	36. 937	7. 792	29. 383	1. 00 22. 27
	atom	1523	0G	SER	196	36. 088	7. 619	30. 511	1. 00 24. 61
25	atom	1524	С	SER	196	35. 376	6. 196	28. 266	1. 00 17. 04
	atom	1525	0	SER	196	34. 159	6. 304	28. 424	1. 00 19. 71
	atom	1526	N	PR0	197	35. 980	5. 003	28. 222	1. 00 15. 92
	atom	1527	CD	PR0	197	37. 379	4. 613	27. 980	1. 00 13. 27
	atom	1528	CA	PR0	197	35. 072	3. 861	28. 422	1. 00 18. 00
3 0	atom	1529	CB	PR0	197	35. 987	2. 627	28. 421	1. 00 14. 58
	atom	1530	CG	PR0	197	37. 391	3. 129	28. 250	1. 00 12. 92
	atom	1531	C	PR0	197	34. 245	3. 988	29. 707	1. 00 21. 73
	atom	1532	0	PR0	197	33. 088	3. 557	29. 760	1. 00 24. 27
	atom	1533	N	GLY	198	34. 829	4. 609	30. 732	1. 00 25. 79
3 5	atom	1534	CA	GLY	198	34. 119	4. 779	31. 995	1. 00 21. 47
	atom	1535	C	GLY	198	32. 938	5. 731	31. 928	1. 00 18. 39

	atom	1536	0	GLY	198	31. 867	5. 480	32. 503	1. 00 15. 12
		1537	N	GLN	199	33. 123	6. 842	31. 235	1. 00 17. 90
	atom			GLN	199	32. 033	7. 798	31. 104	1. 00 23. 69
	atom	1538	CA			32. 587	9. 130	30. 616	1. 00 26. 63
	atom	1539	CB	GLN	199				
5	atom	1540	CG	GLN	199	33. 592	9. 732	31. 595	1. 00 24. 77
	atom	1541	CD	GLN	199	34. 400	10. 856	30. 977	1. 00 29. 54
	atom	1542	0E1	GLN	199	34. 958	10. 715	29. 889	1. 00 23. 75
	atom	1543	NE2	GLN	199	34. 470	11. 982	31. 675	1. 00 29. 26
	atom	1544	C	GLN	199	30. 928	7. 279	30. 172	1. 00 24. 56
10	atom	1545	0	GLN	199	29. 765	7. 678	30. 288	1. 00 28. 87
	atom	1546	N	ARG	200	31. 287	6. 373	29. 264	1. 00 21. 97
	atom	1547	CA	ARG	200	30. 306	5. 803	28. 351	1. 00 21. 41
	atom	1548	CB	ARG	200	30. 965	4. 906	27. 307	1. 00 22. 44
	atom	1549	CG	ARG	200	30. 330	5. 021	25. 941	1. 00 24. 72
15	atom	1550	CD	ARG	200	30. 120	3. 666	25. 239	1. 00 29. 31
	atom	1551	NE	ARG	200	29. 402	3. 853	23. 975	1. 00 27. 95
	atom	1552	CZ	ARG	200	28. 971	2. 872	23. 202	1. 00 28. 38
	atom	1553	NH1	ARG	200	29. 177	1. 603	23. 542	1. 00 39. 86
	atom	1554	NH2	ARG	200	28. 298	3. 161	22. 107	1. 00 33. 61
2 0	atom	1555	С	ARG	200	29. 326	4. 976	29. 138	1. 00 20. 61
	atom	1556	0	ARG	200	28. 120	4. 974	28. 858	1. 00 18. 42
	atom	1557	N	VAL	201	29. 845	4. 258	30. 130	1. 00 20. 11
	atom	1558	CA	VAL	201	28. 981	3. 426	30. 951	1. 00 16. 47
	atom	1559	СВ	VAL	201	29. 818	2. 407	31. 768	1. 00 23. 27
2 5	atom	1560		VAL	201	30. 856	3. 125	32. 639	1. 00 23. 85
	atom	1561		VAL	201	28. 891	1. 532	32. 598	1. 00 26. 32
	atom	1562	С	VAL	201	28. 118	4. 307	31. 850	1. 00 13. 87
	atom	1563	0	VAL	201	26. 908	4. 103	31. 975	1. 00 8. 32
	atom	1564	N	GLU	202	28. 735	5. 321	32. 441	1. 00 17. 54
3 0	atom	1565	CA	GLU	202	28. 018	6. 232	33. 326	1. 00 16. 90
3 0	atom	1566	СВ	GLU	202	28. 951	7. 378	33. 752	1. 00 19. 88
	atom	1567	CG	GLU	202	28. 444	8. 294	34. 881	1. 00 22. 45
	atom	1568	CD	GLU	202	29. 154	9. 672	34. 925	1. 00 27. 15
	atom	1569		GLU	202	30. 263	9. 831	34. 348	1. 00 26. 78
c ב		1570		GLU	202	28. 598	10. 606	35. 548	1. 00 29. 71
3 5	atom					26. 794	6. 785	32. 592	1. 00 23. 11
	atom	1571	C	GLU	202	20. 194	U. 100	34. 334	1. 00 22. 44

	atom	1572	0	GLU	202	25. 698	6. 861	33. 162	1. 00 22. 88
	atom	1573	N	PHE	203	26. 979	7. 124	31. 314	1. 00 19. 14
	atom	1574	CA	PHE	203	25. 915	7. 693	30. 506	1. 00 15. 22
	atom	1575	CB	PHE	203	26. 542	8. 408	29. 300	1. 00 17. 64
5	atom	1576	CG	PHE	203	25. 544	9. 051	28. 376	1. 00 21. 29
	atom	1577	CD1	PHE	203	25. 510	8. 705	27. 024	1. 00 18. 86
	atom	1578	CD2	PHE	203	24. 622	9. 989	28. 857	1. 00 19. 90
	atom	1579	CE1	PHE	203	24. 562	9. 279	26. 150	1. 00 19. 52
	atom	1580	CE2	PHE	203	23. 671	10. 576	28. 002	1. 00 19. 32
10	atom	1581	CZ	PHE	203	23. 639	10. 218	26. 643	1. 00 21. 32
	atom	1582	С	PHE	203	24. 847	6. 677	30. 071	1. 00 18. 08
	atom	1583	0	PHE	203	23. 674	7. 017	29. 943	1. 00 21. 36
	atom	1584	N	LEU	204	25. 222	5. 429	29. 843	1. 00 15. 58
	atom	1585	CA	LEU	204	24. 208	4. 460	29. 435	1. 00 16. 10
15	atom	1586	CB	LEU	204	24. 862	3. 191	28. 864	1. 00 12. 24
	atom	1587	CG	LEU	204	25. 732	3. 460	27. 630	1. 00 20. 18
	atom	1588	CD1	LEU	204	26. 698	2. 271	27. 360	1. 00 11. 68
	atom	1589	CD2	LEU	204	24. 794	3. 757	26. 412	1. 00 15. 33
	atom	1590	C	LEU	204	23. 333	4. 116	30. 641	1. 00 17. 00
20	atom	1591	0	LEU	204	22. 107	4. 178	30. 561	1. 00 14. 29
	atom	1592	N	VAL	205	23. 976	3. 754	31. 754	1. 00 18. 18
	atom	1593	CA	VAL	205	23. 277	3. 406	32. 989	1. 00 17. 32
	atom	1594	CB	VAL	205	24. 299	3. 141	34. 149	1. 00 21. 22
	atom	1595	CG1	VAL	205	23. 589	2. 601	35. 354	1. 00 21. 39
25	atom	1596	CG2	VAL	205	25. 374	2. 141	33. 718	1. 00 13. 01
	atom	1597	C	VAL	205	22. 343	4. 572	33. 378	1. 00 20. 78
	atom	1598	0	VAL	205	21. 143	4. 385	33. 624	1. 00 20. 38
	atom	1599	N	ASN	206	22. 890	5. 780	33. 408	1. 00 22. 91
	atom	1600	CA	ASN	206	22. 107	6. 966	33. 763	1. 00 25. 38
3 0	atom	1601	CB	ASN	206	22. 974	8. 216	33. 745	1. 00 26. 40
	atom	1602	CG	ASN	206	23. 744	8. 389	35. 005	1. 00 19. 55
	atom	1603	0D1	ASN	206	24. 444	9. 382	35. 184	1. 00 21. 80
	atom	1604	ND2	ASN	206	23. 630	7. 416	35. 898	1. 00 23. 29
	atom	1605	C	ASN	206	20. 961	7. 192	32. 815	1. 00 26. 44
3 5	atom	1606	0	ASN	206	19. 839	7. 462	33. 242	1. 00 28. 16
	atom	1607	N	THR	207	21. 256	7. 127	31. 523	1. 00 24. 98

	atom	1608	CA	THR	207	20. 219	7. 313	30. 530	1. 00 21. 70
	atom	1609	СВ	THR	207	20. 753	7. 043	29. 129	1. 00 17. 74
	atom	1610	0G1	THR	207	21. 645	8. 099	28. 752	1. 00 16. 88
	atom	1611	CG2	THR	207	19. 609	6. 968	28. 142	1. 00 22. 24
5	atom	1612	С	THR	207	19. 108	6. 326	30. 861	1. 00 21. 12
	atom	1613	0	THR	207	17. 939	6. 694	30. 952	1. 00 20. 10
	atom	1614	N	TRP	208	19. 505	5. 073	31. 052	1. 00 23. 41
	atom	1615	CA	TRP	208	18. 605	3. 973	31. 400	1. 00 28. 02
	atom	1616	CB	TRP	208	19. 424	2. 689	31. 533	1. 00 27. 05
10	atom	1617	CG	TRP	208	18. 613	1. 453	31. 511	1. 00 31. 65
	atom	1618	CD2	TRP	208	18. 175	0. 738	30. 352	1. 00 33. 96
	atom	1619	CE2	TRP	208	17. 439	-0. 377	30. 803	1. 00 34. 68
	atom	1620	CE3	TRP	208	18. 324	0. 937	28. 975	1. 00 33. 40
	atom	1621	CD1	TRP	208	18. 146	0. 763	32. 586	1. 00 31. 92
15	atom	1622	NE1	TRP	208	17. 440	-0. 339	32. 171	1. 00 35. 78
	atom	1623	CZ2	TRP	208	16. 863	-1. 299	29. 929	1. 00 36. 13
	atom	1624	CZ3	TRP	208	17. 749	0. 019	28. 103	1. 00 31. 62
	atom	1625	CH2	TRP	208	17. 024	-1. 082	28. 586	1. 00 32. 37
	atom	1626	C	TRP	208	17. 836	4. 214	32. 711	1. 00 32. 31
2 0	atom	1627	0	TRP	208	16. 647	3. 906	32. 821	1. 00 34. 09
	atom	1628	N	LYS	209	18. 520	4. 751	33. 716	1. 00 33. 04
	atom	1629	CA	LYS	209	17. 884	5. 016	35. 001	1. 00 33. 68
	atom	1630	CB	LYS	209	18. 943	5. 467	36. 027	1. 00 35. 81
	atom	1631	CG	LYS	209	19. 240	4. 451	37. 153	1. 00 34. 82
2 5	atom	1632	CD	LYS	209	19. 556	3. 046	36. 626	1. 00 30. 83
	atom	1633	CE	LYS	209	20. 925	2. 582	37. 117	1. 00 33. 81
	atom	1634	NZ	LYS	209	20. 971	1. 146	37. 574	1. 00 30. 23
	atom	1635	C	LYS	209	16. 785	6. 077	34. 881	1. 00 33. 73
	atom	1636	0	LYS	209	15. 681	5. 911	35. 407	1. 00 35. 70
3 0	atom	1637	N	SER	210	17. 102	7. 163	34. 185	1. 00 34. 05
	atom	1638	CA	SER	210	16. 188	8. 279	33. 979	1. 00 33. 11
	atom	1639	СВ	SER	210	16. 905	9. 384	33. 211	1. 00 31. 63
	atom	1640	OG	SER	210	17. 028	9. 031	31. 838	1. 00 26. 49
	atom	1641	C	SER	210	14. 932	7. 896	33. 208	1. 00 36. 12
3 5	atom	1642	0	SER	210	14. 069	8. 733	32. 955	1. 00 38. 49
	atom	1643	N	LYS	211	14. 836	6. 638	32. 812	1. 00 37. 66

	atom	1644	CA	LYS	211	13. 683	6. 188	32. 062	1. 00 38. 76
	atom	1645	СВ	LYS	211	14. 154	5. 357	30. 865	1. 00 39. 23
	atom	1646	CG	LYS	211	14. 039	6. 076	29. 532	1. 00 43. 26
	atom	1647	CD	LYS	211	14. 542	7. 523	29. 589	1. 00 36. 45
5	atom	1648	CE	LYS	211	15. 434	7. 817	28. 384	1. 00 35. 75
	atom	1649	NZ	LYS	211	15. 475	9. 271	28. 025	1. 00 36. 57
	atom	1650	C	LYS	211	12. 756	5. 360	32. 953	1. 00 41. 48
	atom	1651	0	LYS	211	13. 161	4. 326	33. 493	1. 00 40. 77
	atom	1652	N	LYS	212	11. 514	5. 815	33. 108	1. 00 41. 02
10	atom	1653	CA	LYS	212	10. 539	5. 100	33. 922	1. 00 39. 98
	atom	1654	CB	LYS	212	9. 167	5. 736	33. 779	1. 00 38. 68
	atom	1655	CG	LYS	212	8. 418	5. 845	35. 095	1. 00 38. 52
	atom	1656	CD	LYS	212	7. 007	6. 349	34. 886	1. 00 40. 92
	atom	1657	CE	LYS	212	6. 969	7. 864	34. 750	1. 00 39. 61
15	atom	1658	NZ	LYS	212	8. 305	8. 448	34. 458	1. 00 39. 84
	atom	1659	C	LYS	212	10. 472	3. 650	33. 477	1. 00 42. 66
	atom	1660	0	LYS	212	10. 675	2. 720	34. 272	1. 00 43. 97
	atom	1661	N	ASN	213	10. 176	3. 460	32. 198	1. 00 43. 21
	atom	1662	CA	ASN	213	10. 111	2. 123	31. 632	1. 00 44. 99
2 0	atom	1663	CB	ASN	213	8. 687	1. 812	31. 218	1. 00 44. 32
	atom	1664	CG	ASN	213	7. 848	1. 389	32. 394	1. 00 47. 00
	atom	1665	0D1	ASN	213	7. 978	0. 264	32. 885	1. 00 47. 23
	atom	1666	ND2	ASN	213	6. 994	2. 291	32. 871	1. 00 44. 11
	atom	1667	С	ASN	213	11. 077	2. 061	30. 457	1. 00 45. 25
25	atom	1668	0	ASN	213	10. 706	2. 296	29. 302	1. 00 48. 85
	atom	1669	N	PR0	214	12. 347	1. 740	30. 754	1. 00 42. 66
	atom	1670	CD	PRO	214	12. 779	1. 421	32. 126	1. 00 41. 11
	atom	1671	CA	PR0	214	13. 465		29. 815	1. 00 38. 85
	atom	1672	СВ	PRO	214	14. 679	1. 443	30. 730	1. 00 39. 58
3 0	atom	1673	CG	PRO	214	14. 122		31. 913	1. 00 40. 23
	atom	1674	C	PRO	214	13. 414	0. 552	28. 745	1. 00 33. 30
	atom	1675	0	PRO	214	13. 110	-0. 612	29. 022	1. 00 29. 69
	atom	1676	N	MET	215	13. 727	0. 972	27. 520	1. 00 29. 02
	atom	1677	CA	MET	215	13. 797	0. 076	26. 372	1. 00 28. 18
3 5	atom	1678	СВ	MET	215	12. 484		25. 590	1. 00 31. 27
	atom	1679	CG	MET	215	12. 454	-1. 102	24. 548	1. 00 32. 65

```
-0.662
                                                               22. 962
                                                                        1. 00 44. 77
                                            13. 237
                          MET
                                 215
      atom
              1680
                     SD
                                                       0.671
                                                               22. 382
                                                                        1. 00 31. 33
                     CE
                          MET
                                 215
                                            12. 148
              1681
      atom
                                                                        1. 00 25. 30
                                            14.869
                                                       0.639
                                                               25. 481
                     C
                          MET
                                 215
              1682
      atom
                                                               25. 208
                                                                        1. 00 23. 84
                                            14. 883
                                                       1.830
      atom
              1683
                     0
                          MET
                                 215
                                                     -0.224
                                                               25. 045
                                                                        1. 00 22. 88
                          GLY
                                 216
                                            15. 772
              1684
                     N
 5
      atom
                                                               24. 184
                                            16.840
                                                       0. 215
                                                                        1. 00 26. 69
                     CA
                          GLY
                                 216
              1685
      atom
                                                     -0.813
                                                               23. 126
                                                                         1. 00 28. 78
                                            17. 160
                          GLY
                                 216
              1686
                     C
      atom
                                                     -1.996
                                                               23. 283
                                                                         1. 00 24. 75
                          GLY
                                            16. 853
              1687
                                 216
                     0
      atom
                                                     -0.344
                                                               22. 046
                                                                         1. 00 27. 24
                          PHE
                                 217
                                            17. 778
              1688
                     N
      atom
                                                                         1. 00 22. 26
                                                     -1. 197
                                                               20. 938
                          PHE
                                 217
                                            18. 162
      atom
              1689
                     CA
10
                          PHE
                                            17.000
                                                     -1. 345
                                                               19. 931
                                                                         1. 00 21. 51
                     CB
                                 217
              1690
      atom
                                                                         1. 00 24. 23
                                            16.623
                                                     -0.057
                                                               19. 212
              1691
                     CG
                          PHE
                                 217
      atom
                                                                         1.00 18.03
                                                               19. 701
                                            15. 596
                                                       0.761
                     CD1 PHE
                                 217
              1692
      atom
                                            17. 322
                                                       0.359
                                                               18.066
                                                                         1. 00 24. 84
                     CD2 PHE
                                 217
              1693
      atom
                                                               19.070
                                                                         1. 00 14. 77
                                                       1.974
              1694
                     CE1 PHE
                                 217
                                            15. 277
      atom
15
                                                                         1. 00 17. 90
                                                       1. 582
                                                               17. 426
                     CE2 PHE
                                            17. 007
              1695
                                 217
      atom
                     CZ
                          PHE
                                 217
                                            15. 986
                                                       2. 384
                                                               17. 933
                                                                         1. 00 18. 19
              1696
      atom
                                                                         1. 00 23. 61
                                                      -0.619
                                                               20. 230
                          PHE
                                            19. 380
              1697
                     C
                                 217
      atom
                                                               20. 273
                                                                         1.00 18.23
                                  217
                                            19.649
                                                       0. 595
                          PHE
               1698
                     0
      atom
                                                                         1.00 21.59
                                                               19. 588
                     N
                          SER
                                  218
                                            20. 130
                                                     -1.504
              1699
      atom
20
                                                               18.837
                                                                         1. 00 20. 66
                                 218
                                            21. 273
                                                      -1.075
                          SER
      atom
               1700
                      CA
                                            22. 447
                                                      -2.013
                                                               19. 053
                                                                         1. 00 18. 24
                          SER
                                  218
               1701
                      CB
      atom
                                                                         1. 00 31. 33
                                            22. 156
                                                      -3.312
                                                               18. 588
               1702
                      0G
                          SER
                                  218
      atom
                                            20. 752
                                                      -1. 166
                                                               17. 425
                                                                         1. 00 18. 59
                          SER
                                  218
               1703
                      C
      atom
                                                                         1. 00 22. 08
                                             19. 708
                                                      -1.733
                                                               17. 192
               1704
                      0
                          SER
                                  218
      atom
25
                                                                         1.00 20.71
                                                      -0.570
                                                               16. 487
                          TYR
                                  219
                                            21. 453
               1705
                      N
      atom
                                                               15. 115
                                                                         1.00 24.24
                                            21. 031
                                                      -0.629
                          TYR
                                  219
               1706
                      CA
      atom
                                                                         1. 00 25. 03
                          TYR
                                  219
                                             20. 477
                                                       0.718
                                                               14. 653
      atom
               1707
                      CB
                                                                         1. 00 30. 08
                                                       0.621
                                                               13. 290
                      CG
                          TYR
                                  219
                                             19. 842
      atom
               1708
                                                       0.242
                                                               13. 155
                                                                         1. 00 28. 21
                      CD1 TYR
                                  219
                                             18. 504
               1709
3 0
      atom
                                                                         1.00 28.31
                                                       0.080
                                                                11.902
                      CE1 TYR
                                  219
                                             17. 921
               1710
      atom
                                                                         1.00 23.75
                                                       0.849
                                                                12. 132
                      CD2 TYR
                                  219
                                             20. 582
               1711
      atom
                                                       0.688
                                                                10.871
                                                                         1. 00 26. 41
                                             20.003
                      CE2 TYR
                                  219
               1712
      atom
                                                                         1. 00 25. 69
                      CZ
                                  219
                                             18. 677
                                                       0. 298
                                                                10. 765
               1713
                          TYR
       atom
                                                       0.059
                                                                 9. 531
                                                                         1. 00 24. 99
                      OH
                           TYR
                                  219
                                             18. 123
       atom
               1714
35
                                                      -0.961
                                                                14. 343
                                                                         1. 00 25. 43
                                             22. 281
               1715
                      C
                           TYR
                                  219
       atom
```

	atom	1716	0	TYR	219	23. 206	-0. 153	14. 297	1. 00 26. 39
	atom	1717	N	ASP	220	22. 329	-2. 156	13. 769	1. 00 28. 31
	atom	1718	CA	ASP	220	23. 496	-2. 558	12. 996	1. 00 31. 56
	atom	1719	CB	ASP	220	23. 830	-4. 030	13. 226	1. 00 33. 93
5	atom	1720	CG	ASP	220	25. 261	-4. 361	12. 827	1. 00 42. 92
	atom	1721	0D1	ASP	220	26. 170	-3. 557	13. 165	1. 00 40. 05
	atom	1722	0D2	ASP	220	25. 476	-5. 410	12. 170	1. 00 44. 65
	atom	1723	C	ASP	220	23. 227	-2. 320	11. 520	1. 00 33. 04
	atom	1724	0	ASP	220	22. 497	-3. 073	10. 877	1. 00 31. 00
10	atom	1725	N	THR	221	23. 808	-1. 263	10. 980	1. 00 32. 02
	atom	1726	CA	THR	221	23. 591	-0. 958	9. 581	1. 00 38. 44
	atom	1727	CB	THR	221	23. 564	0. 584	9. 406	1. 00 41. 81
	atom	1728	0G1	THR	221	24. 010	0. 941	8. 092	1. 00 50. 19
	atom	1729	CG2	THR	221	24. 430	1. 251	10. 476	1. 00 41. 82
15	atom	1730	C	THR	221	24. 656	-1. 663	8. 704	1. 00 38. 27
	atom	1731	0	THR	221	25. 861	-1. 558	8. 961	1. 00 37. 56
	atom	1732	N	ARG	222	24. 204	-2. 402	7. 689	1. 00 36. 38
	atom	1733	CA	ARG	222	25. 105	-3. 153	6. 805	1. 00 38. 82
	atom	1734	CB	ARG	222	24. 277	-4 . 055	5. 887	1. 00 44. 88
20	atom	1735	CG	ARG	222	24. 392	-5. 532	6. 237	1. 00 55. 39
	atom	1736	CD	ARG	222	24. 585	-6. 394	5. 000	1. 00 60. 84
	atom	1737	NE	ARG	222	25. 888	-6. 166	4. 375	1. 00 65. 59
	atom	1738	CZ	ARG	222	26. 415	-6. 937	3. 424	1. 00 66. 51
	atom	1739	NH1	ARG	222	25. 751	−7. 997	2. 976	1. 00 65. 57
2 5	atom	1740	NH2	ARG	222	27. 611	-6. 649	2. 921	1. 00 67. 20
	atom	1741	C	ARG	222	26. 087	-2. 312	5. 964	1. 00 35. 30
	atom	1742	0	ARG	222	25. 664	-1. 489	5. 144	1. 00 34. 68
	atom	1743	N	CYS	223	27. 391	−2. 552	6. 140	1. 00 28. 37
	atom	1744	CA	CYS	223	28. 425	−1. 786	5. 431	1. 00 25. 64
3 0	atom	1745	CB	CYS	223	28. 693	-2 . 330	4. 026	1. 00 28. 82
	atom	1746	SG	CYS	223	27. 878	-3. 882	3. 597	1. 00 38. 53
	atom	1747	С	CYS	223	27. 953	-0. 345	5. 334	1. 00 24. 16
	atom	1748	0	CYS	223	27. 476	0. 127	4. 296	1. 00 26. 66
	atom	1749	N	PHE	224	28. 069	0. 355	6. 445	1. 00 19. 76
3 5	atom	1750	CA	PHE	224	27. 617	1. 720	6. 495	1. 00 17. 21
	atom	1751	CB	PHE	224	27. 856	2. 311	7. 877	1. 00 11. 71

	atom	1752	CG	PHE	224	27. 251	3. 641	8. 038	1. 00 6. 54
	atom	1753	CD1	PHE	224	28. 009	4. 766	7. 904	1. 00 3. 35
	atom	1754	CD2	PHE	224	25. 892	3. 765	8. 248	1. 00 12. 53
	atom	1755	CE1	PHE	224	27. 436	6. 004	7. 966	1. 00 12. 14
5	atom	1756	CE2	PHE	224	25. 299	5. 013	8. 317	1. 00 17. 37
	atom	1757	CZ	PHE	224	26. 080	6. 136	8. 172	1. 00 12. 23
	atom	1758	С	PHE	224	28. 303	2. 578	5. 449	1. 00 20. 24
	atom	1759	0	PHE	224	27. 700	3. 501	4. 899	1. 00 18. 35
	atom	1760	N	ASP	225	29. 573	2. 269	5. 197	1. 00 19. 31
10	atom	1761	CA	ASP	225	30. 362	3. 005	4. 227	1. 00 16. 43
	atom	1762	CB	ASP	225	31. 798	2. 482	4. 217	1. 00 18. 29
	atom	1763	CG	ASP	225	32. 601	2. 966	5. 417	1. 00 19. 09
	atom	1764	0D1	ASP	225	31. 977	3. 479	6. 366	1. 00 17. 99
	atom	1765	0D2	ASP	225	33. 845	2. 837	5. 415	1. 00 17. 38
15	atom	1766	C	ASP	225	29. 760	2. 899	2. 842	1. 00 17. 37
	atom	1767	0	ASP	225	29. 723	3. 883	2. 110	1. 00 20. 94
	atom	1768	N	SER	226	29. 261	1. 717	2. 492	1. 00 15. 11
	atom	1769	CA	SER	226	28. 673	1. 514	1. 176	1. 00 14. 56
	atom	1770	CB	SER	226	28. 655	0. 021	0. 851	1. 00 17. 21
2 0	atom	1771	0G	SER	226	29. 953	-0. 366	0. 410	1. 00 21. 67
	atom	1772	C	SER	226	27. 276	2. 113	0. 982	1. 00 14. 33
	atom	1773	0	SER	226	26. 799	2. 244	-0. 147	1. 00 10. 11
	atom	1774	N	THR	227	26. 623	2. 490	2. 073	1. 00 9. 91
	atom	1775	CA	THR	227	25. 294	3. 071	1. 971	1. 00 8. 56
25	atom	1776	CB	THR	227	24. 369	2. 649	3. 150	1. 00 10. 08
	atom	1777	0G1	THR	227	24. 792	3. 302	4. 359	1. 00 12. 01
	atom	1778	CG2	THR	227	24. 418	1. 143	3. 355	1. 00 10. 18
	atom	1779	C	THR	227	25. 350	4. 574	1. 969	1. 00 6. 14
	atom	1780	0	THR	227	24. 344	5. 214	1. 758	1. 00 11. 13
3 0	atom	1781	N	VAL	228	26. 513	5. 153	2. 230	1. 00 5. 87
	atom	1782	CA	VAL	228	26. 582	6. 601	2. 228	1. 00 9. 08
	atom	1783	CB	VAL	228	27. 858	7. 094	2. 921	1. 00 7. 34
	atom	1784	CG1	VAL	228	27. 948	8. 626	2. 854	1. 00 6. 44
	atom	1785	CG2	VAL	228	27. 844	6. 631	4. 371	1. 00 9. 87
3 5	atom	1786	C	VAL	228	26. 515	7. 106	0. 781	1. 00 12. 58
	atom	1787	0	VAL	228	27. 266	6. 663	-0. 092	1. 00 14. 27

	atom	1788	N	THR	229	25. 599	8. 031	0. 532	1. 00 10. 63
	atom	1789	CA	THR	229	25. 429	8. 566	-0. 799	1. 00 8. 72
	atom	1790	СВ	THR	229	23. 944	8. 879	-1. 091	1. 00 7. 09
	atom	1791	0G1	THR	229	23. 484	9. 923	-0. 228	1. 00 5. 58
5	atom	1792	CG2	THR	229	23. 100	7. 649	-0. 881	1. 00 5. 09
	atom	1793	С	THR	229	26. 245	9. 821	-1. 001	1. 00 15. 73
	atom	1794	0	THR	229	26. 903	10. 327	-0. 070	1. 00 17. 77
	atom	1795	N	GLU	230	26. 209	10. 321	-2. 229	1. 00 15. 28
	atom	1796	CA	GLU	230	26. 933	11. 522	-2. 568	1. 00 16. 64
10	atom	1797	CB	GLU	230	26. 949	11. 705	-4. 082	1. 00 26. 00
	atom	1798	CG	GLU	230	27. 757	10. 621	-4. 804	1. 00 34 06
	atom	1799	CD	GLU	230	28. 196	11. 032	-6. 212	1. 00 38. 31
	atom	1800	0E1	GLU	230	27. 683	12. 059	-6. 730	1. 00 37. 25
	atom	1801	0E2	GLU	230	29. 042	10. 315	-6. 799	1. 00 39. 10
15	atom	1802	С	GLU	230	26. 170	12. 632	-1. 885	1. 00 17. 08
	atom	1803	0	GLU	230	26. 756	13. 625	-1. 413	1. 00 16. 22
	atom	1804	N	ASN	231	24. 853	12. 447	-1. 827	1. 00 11. 51
	atom	1805	CA	ASN	231	23. 985	13. 406	-1. 165	1. 00 13. 50
	atom	1806	CB	ASN	231	22. 547	12. 925	-1. 153	1. 00 19. 01
2 0	atom	1807	CG	ASN	231	21. 666	13. 780	-0. 266	1. 00 22. 76
	atom	1808	0D1	ASN	231	21. 399	13. 441	0. 909	1. 00 20 68
	atom	1809	ND2	ASN	231	21. 202	14. 897	-0. 820	1. 00 17. 27
	atom	1810	C	ASN	231	24. 424	13. 570	0. 285	1. 00 14. 00
	atom	1811	0	ASN	231	24. 589	14. 691	0. 765	1. 00 13. 52
25	atom	1812	N	ASP	232	24. 593	12. 437	0. 974	1. 00 8. 91
	atom	1813	CA	ASP	232	25. 013	12. 407	2. 372	1. 00 2. 20
	atom	1814	CB	ASP	232	25. 279	10. 970	2. 794	1. 00 2. 00
	atom	1815	CG	ASP	232	24. 033	10. 129	2. 822	1. 00 3. 69
	atom	1816	0D1	ASP	232	24. 182	8. 903	2. 689	1. 00 10. 01
3 0	atom	1817	0D2	ASP	232	22. 918	10. 669	2. 991	1. 00 2. 00
	atom	1818	С	ASP	232	26. 290	13. 211	2. 589	1. 00 7. 59
	atom	1819	0	ASP	232	26. 374	14. 055	3. 490	1. 00 6. 64
	atom	1820	N	ILE	233	27. 295	12. 907		1. 00 8. 41
	atom	1821	CA	ILE	233	28. 588	13. 565	1. 820	1. 00 11. 32
3 5	atom	1822	CB	ILE	233	29. 612	12. 848	0. 900	1. 00 15. 31
	atom	1823	CG2	ILE	233	30. 929	13. 593	0. 898	1. 00 9. 82

```
1.00 14.26
                                                      11. 416
                                                                1. 384
              1824
                     CG1 ILE
                                 233
                                            29. 813
      atom
                                                                         1. 00 19. 91
                     CD1 ILE
                                            29. 979
                                                      10. 419
                                                                0. 281
              1825
                                 233
      atom
                                                                1. 420
                                                                         1. 00 13. 30
                     C
                                 233
                                            28. 481
                                                      15. 035
              1826
                          ILE
      atom
              1827
                     0
                          ILE
                                 233
                                            29. 285
                                                      15. 857
                                                                 1.880
                                                                         1. 00 10. 15
      atom
                                                                0.574
                                                                         1. 00 7. 69
                          ARG
                                 234
                                            27. 498
                                                      15. 368
              1828
                     N
      atom
 5
                                            27. 331
                                                      16.768
                                                                0.184
                                                                         1.00 10.10
                          ARG
                                 234
              1829
                     CA
      atom
                                                               -1.103
                                                                         1.00 6.01
                          ARG
                                 234
                                            26. 530
                                                      16. 900
      atom
              1830
                     CB
                                                      17. 138
                                                               -2. 298
                                                                         1. 00 17. 01
                          ARG
                                 234
                                            27. 417
      atom
              1831
                     CG
                                                                         1. 00 21. 96
                     CD
                          ARG
                                  234
                                            26. 619
                                                      17. 293
                                                               -3.600
              1832
      atom
                                                      16. 371
                                                               -4.630
                                                                         1. 00 24. 65
              1833
                     NE
                          ARG
                                  234
                                            27. 082
      atom
10
                                                      15. 365
                                                               -5. 111
                                                                         1.00 34.89
                          ARG
                                  234
                                            26. 349
              1834
                     CZ
      atom
                                            25. 113
                                                      15. 153
                                                               -4.656
                                                                         1. 00 34. 61
                     NH1 ARG
                                  234
              1835
      atom
                                                               -6.037
                                                                         1. 00 31. 42
              1836
                     NH2 ARG
                                  234
                                            26. 851
                                                      14. 553
      atom
                                                                         1.00 8.60
                                            26. 625
                                                      17. 475
                                                                 1. 322
              1837
                          ARG
                                  234
      atom
                     C
                                            26. 956
                                                      18. 600
                                                                 1. 665
                                                                         1. 00 14. 56
              1838
                     0
                          ARG
                                  234
15
      atom
                                  235
                                            25. 656
                                                      16. 787
                                                                 1. 905
                                                                         1. 00 9. 72
              1839
                     N
                          VAL
      atom
                                                                 3.039
                                                                         1. 00 13. 66
                          VAL
                                  235
                                            24. 902
                                                      17. 288
              1840
                     CA
      atom
                                                                         1. 00 19. 56
                          VAL
                                  235
                                            23.873
                                                      16. 229
                                                                 3.508
              1841
                     CB
      atom
                                                                 4.897
                                                                         1.00 20.84
                                  235
                                            23. 341
                                                      16. 596
      atom
              1842
                     CG1 VAL
                                                                         1.00 8.84
                                  235
                                            22. 725
                                                      16. 119
                                                                 2. 487
                     CG2 VAL
20
      atom
              1843
                                                                         1. 00 18. 09
              1844
                     C
                          VAL
                                  235
                                             25. 946
                                                      17. 544
                                                                 4. 137
      atom
                                                                         1. 00 15. 25
                          VAL
                                  235
                                             25. 908
                                                      18. 550
                                                                 4. 853
              1845
                     0
      atom
                          GLU
                                  236
                                            26. 893
                                                      16. 622
                                                                 4. 250
                                                                         1. 00 16. 55
              1846
                     N
      atom
                                            27. 974
                                                                 5. 209
                                                                         1. 00 21. 32
                                                      16. 776
      atom
              1847
                     CA
                          GLU
                                  236
                                                                 4. 987
                                                                         1. 00 25. 28
                                                      15. 693
                     CB
                          GLU
                                  236
                                             29. 018
              1848
25
      atom
                                                                         1.00 26.53
                          GLU
                                  236
                                             29. 445
                                                      14. 939
                                                                 6. 205
              1849
                     CG
      atom
                                                                 5.831
                                                                         1. 00 30. 94
                                             30. 090
                                                      13. 622
      atom
               1850
                     CD
                          GLU
                                  236
                                                                         1. 00 30. 71
                     OE1 GLU
                                  236
                                             29. 355
                                                      12. 613
                                                                 5. 779
               1851
      atom
                                                                 5. 585
                                                                         1. 00 29. 82
               1852
                     OE2 GLU
                                  236
                                             31. 321
                                                      13.604
      atom
                                                      18. 136
                                                                 5.009
                                                                         1. 00 23 02
                                  236
                                             28. 647
30
      atom
               1853
                     C
                          GLU
                                                                 5.854
                                                                         1. 00 27. 89
                                             28. 558
                                                      19.013
               1854
                     0
                          GLU
                                  236
      atom
                                                                 3.882
                                                                         1. 00 25. 21
                          GLU
                                  237
                                             29. 329
                                                      18. 303
               1855
                      N
      atom
                                                                 3. 581
                                                                          1. 00 25. 51
                                  237
                                             30. 035
                                                      19. 547
      atom
               1856
                      CA
                          GLU
                                                                         1. 00 28. 35
                          GLU
                                  237
                                             30. 327
                                                      19. 612
                                                                 2. 087
               1857
                      CB
      atom
                                             31.306
                                                                 1.692
                                                                          1. 00 28. 67
               1858
                      CG
                          GLU
                                  237
                                                      20. 686
35
      atom
                                                                 0.744
                                                                         1. 00 30. 11
                                  237
                                             30. 690
                                                      21. 709
               1859
                      CD
                          GLU
      atom
```

	atom	1860	0E1	GLU	237	29. 455	21. 703	0. 543	1. 00 32. 75
	atom	1861	0E2	GLU	237	31. 443	22. 529	0. 196	1. 00 28. 55
	atom	1862	С	GLU	237	29. 312	20. 829	4. 021	1. 00 27. 38
	atom	1863	0	GLU	237	29. 936	21. 737	4. 603	1. 00 25. 26
5	atom	1864	N	SER	238	28. 004	20. 900	3. 758	1. 00 25. 92
	atom	1865	CA	SER	238	27. 221	22, 089	4. 113	1. 00 22. 66
	atom	1866	СВ	SER	238	25. 820	22. 024	3. 481	1. 00 16. 27
	atom	1867	0G	SER	238	24. 918	21. 202	4. 201	1. 00 20. 41
	atom	1868	С	SER	238	27. 130	22. 344	5. 619	1. 00 22. 53
10	atom	1869	0	SER	238	26. 926	23. 481	6. 055	1. 00 23. 80
	atom	1870	N	ILE	239	27. 278	21. 286	6. 408	1. 00 19. 38
	atom	1871	CA	ILE	239	27. 271	21. 416	7. 863	1. 00 18. 62
	atom	1872	СВ	ILE	239	27. 138	20. 044	8. 548	1. 00 12. 66
	atom	1873	CG2	ILE	239	27. 433	20. 172	10. 031	1. 00 13. 29
15	atom	1874	CG1	ILE	239	25. 719	19. 513	8. 320	1. 00 9. 59
	atom	1875	CD1	ILE	239	25. 482	18. 160	8. 914	1. 00 8. 77
	atom	1876	С	ILE	239	28. 620	22. 050	8. 240	1. 00 19. 33
	atom	1877	0	ILE	239	28. 675	23. 007	9. 002	1. 00 22. 17
	atom	1878	N	TYR	240	29. 706	21. 512	7. 692	1. 00 18. 63
20	atom	1879	CA	TYR	240	31. 033	22. 060	7. 937	1. 00 15. 25
	atom	1880	CB	TYR	240	32. 101	21. 358	7. 099	1. 00 12. 94
	atom	1881	CG	TYR	240	32. 232	19. 879	7. 303	1. 00 15. 61
	atom	1882	CD1	TYR	240	31. 810	19. 268	8. 494	1. 00 7. 96
	atom	1883	CE1	TYR	240	31. 900	17. 894	8. 658	1. 00 14. 82
25	atom	1884	CD2	TYR	240	32. 751	19. 070	6. 279	1. 00 12. 69
	atom	1885	CE2	TYR	240	32. 845	17. 684	6. 428	1. 00 13. 70
	atom	1886	CZ	TYR	240	32. 412	17. 100	7. 622	1. 00 19. 88
	atom	1887	OH	TYR	240	32. 459	15. 729	7. 766	1. 00 22. 17
	atom	1888	С	TYR	240	31. 060	23. 524	7. 527	1. 00 17. 48
3 0	atom	1889	0	TYR	240	31. 664	24. 344	8. 210	1. 00 18. 27
	atom	1890	N	GLN	241	30. 417	23. 846	6. 401	1. 00 16. 83
	atom	1891	CA	GLN	241	30. 428	25. 219	5. 900	1. 00 16. 08
	atom	1892	CB	GLN	241	29. 932	25. 296	4. 439	1. 00 16. 21
	atom	1893	CG	GLN	241	30. 778	24. 585	3. 374	1. 00 9. 37
3 5	atom	1894	CD	GLN	241	32. 164	25. 184	3. 171	1. 00 17. 64
	atom	1895	0E1	GLN	241	32. 458	26. 302	3. 620	1. 00 14. 54

	atom	1896	NE2	GLN	241	33. 032	24. 432	2. 484	1. 00 16. 20
	atom	1897	C	GLN	241	29. 578	26. 137	6. 768	1. 00 18. 69
	atom	1898	0	GLN	241	29. 616	27. 355	6. 628	1. 00 18. 09
	atom	1899	N	CYS	242	28. 786	25. 560	7. 655	1. 00 19. 26
5	atom	1900	CA	CYS	242	27. 983	26. 385	8. 519	1. 00 17. 13
	atom	1901	CB	CYS	242	26. 889	25. 548	9. 145	1. 00 16. 03
	atom	1902	SG	CYS	242	25. 549	25. 325	7. 971	1. 00 24. 62
	atom	1903	C	CYS	242	28. 922	26. 979	9. 568	1. 00 21. 09
	atom	1904	0	CYS	242	28. 552	27. 911	10. 295	1. 00 19. 82
10	atom	1905	N	CYS	243	30. 141	26. 436	9. 617	1. 00 21. 37
	atom	1906	CA	CYS	243	31. 188	26. 907	10. 534	1. 00 24. 50
	atom	1907	CB	CYS	243	32. 382	25. 951	10. 579	1. 00 15. 34
	atom	1908	SG	CYS	243	32. 092	24. 409	11. 389	1. 00 29. 68
	atom	1909	C	CYS	243	31. 730	28. 235	10. 034	1. 00 26. 31
15	atom	1910	0	CYS	243	31. 511	28. 621	8. 883	1. 00 21. 13
	atom	1911	N	ASP	244	32. 445	28. 920	10. 919	1. 00 28. 04
	atom	1912	CA	ASP	244	33. 085	30. 174	10. 580	1. 00 27. 16
	atom	1913	CB	ASP	244	33. 130	31. 100	11. 784	1. 00 29. 16
	atom	1914	CG	ASP	244	33. 905	32. 357	11. 514	1. 00 31. 43
2 0	atom	1915	0D1	ASP	244	35. 117	32. 266	11. 220	1. 00 37. 16
	atom	1916	0D2	ASP	244	33. 294	33. 441	11. 590	1. 00 36. 68
	atom	1917	C	ASP	244	34. 487	29. 727	10. 237	1. 00 25. 91
	atom	1918	0	ASP	244	35. 279	29. 447	11. 129	1. 00 26. 07
	atom	1919	N	LEU	245	34. 776	29. 634	8. 944	1. 00 26. 85
2 5	atom	1920	CA	LEU	245	36. 088	29. 191	8. 467	1. 00 25. 33
	atom	1921	CB	LEU	245	35. 944	27. 889	7. 661	1. 00 23. 00
	atom	1922	CG	LEU	245	35. 291	26. 675	8. 334	1. 00 23. 70
	atom	1923	CD1	LEU	245	34. 274	26. 094	7. 391	1. 00 24. 92
	atom	1924	CD2	LEU	245	36. 349	25. 633	8. 710	1. 00 23. 20
3 0	atom	1925	C	LEU	245	36. 846	30. 213	7. 609	1. 00 25. 10
	atom	1926	0	LEU	245	36. 262	31. 073	6. 931	1. 00 19. 47
	atom	1927	N	ALA	246	38. 165	30. 127	7. 661	1. 00 22. 80
	atom	1928	CA	ALA	246	38. 968	31. 003	6. 841	1. 00 24. 53
	atom	1929	CB	ALA	246	40. 432	30. 626	6. 981	1. 00 18. 27
3 5	atom	1930	С	ALA	246	38. 488	30. 761	5. 391	1. 00 25. 10
	atom	1931	0	ALA	246	38. 089	29. 647	5. 030	1. 00 21. 52

	atom	1932	N	PRO	247	38. 515	31. 802	4. 549	1. 00 25. 86
	atom	1933	CD	PRO	247	38. 964	33. 168	4. 880	1. 00 26. 97
	atom	1934	CA	PRO	247	38. 086	31. 683	3. 146	1. 00 24. 74
	atom	1935	СВ	PRO	247	38. 381	33. 070	2. 561	1. 00 24. 27
5	atom	1936	CG	PRO	247	38. 414	33. 994	3. 744	1. 00 23. 86
	atom	1937	С	PRO	247	38. 806	30. 564	2. 363	1. 00 25. 32
	atom	1938	0	PRO	247	38. 227	29. 934	1. 483	1. 00 27. 92
	atom	1939	N	GLU	248	40. 070	30. 335	2. 693	1. 00 26. 43
	atom	1940	CA	GLU	248	40. 895	29. 310	2. 064	1. 00 29. 15
10	atom	1941	СВ	GLU	248	42. 361	29. 577	2. 371	1. 00 35. 18
	atom	1942	CG	GLU	248	42. 988	30. 634	1. 512	1. 00 40. 16
	atom	1943	CD	GLU	248	44. 358	30. 220	1. 075	1. 00 42. 56
	atom	1944	0E1	GLU	248	44. 555	29. 000	0. 850	1. 00 42. 61
	atom	1945	0E2	GLU	248	45. 232	31. 109	0. 966	1. 00 46. 82
15	atom	1946	C	GLU	248	40. 565	27. 908	2. 561	1. 00 32. 21
	atom	1947	0	GLU	248	40. 986	26. 914	1. 967	1. 00 35. 04
	atom	1948	N	ALA	249	39. 866	27. 829	3. 684	1. 00 26. 94
	atom	1949	CA	ALA	249	39. 477	26. 542	4. 232	1. 00 27. 37
	atom	1950	CB	ALA	249	39. 255	26. 651	5. 769	1. 00 26. 86
20	atom	1951	C	ALA	249	38. 178	26. 153	3. 524	1. 00 24. 28
	atom	1952	0	ALA	249	37. 995	25. 002	3. 128	1. 00 21. 70
	atom	1953	N	ARG	250	37. 293	27. 136	3. 362	1. 00 20 43
	atom	1954	CA	ARG	250	36. 021	26. 932	2. 700	1. 00 23. 31
	atom	1955	CB	ARG	250	35. 296	28. 256	2. 585	1. 00 23. 72
25	atom	1956	CG	ARG	250	34. 488	28. 629	3. 788	1. 00 28. 13
	atom	1957	CD	ARG	250	33. 625	29. 837	3. 472	1. 00 24. 38
	atom	1958	NE	ARG	250	33. 181	30. 546	4. 674	1. 00 31. 26
	atom	1959	CZ	ARG	250	32. 473	30. 001	5. 659	1. 00 28. 67
	atom	1960	NH1	ARG	250	32. 115	28. 727	5. 600	1. 00 28. 56
3 0	atom	1961	NH2	ARG	250	32. 115	30. 736	6. 702	1. 00 34. 72
	atom	1962	C	ARG	250	36. 224	26. 353	1. 308	1. 00 23. 99
	atom	1963	0	ARG	250	35. 535	25. 426	0. 898	1. 00 24. 35
	atom	1964	N	GLN	251	37. 178	26. 914	0. 580	1. 00 29. 27
	atom	1965	CA	GLN	251	37. 475		-0. 779	1. 00 34. 81
3 5	atom	1966	CB	GLN	251	38. 363		-1. 477	1. 00 36. 88
	atom	1967	CG	GLN	251	38. 883	27. 078	-2. 832	1. 00 42. 09

	atom	1968	CD	GLN	251	37. 819	27. 097	-3. 916	1. 00 45. 34
	atom	1969	0E1	GLN	251	36. 724	27. 641	-3. 742	1. 00 43. 73
	atom	1970	NE2	GLN	251	38. 142	26. 494	-5. 052	1. 00 49. 17
	atom	1971	С	GLN	251	38. 169	25. 103	-0. 749	1. 00 33. 48
5	atom	1972	0	GLN	251	38. 177	24. 362	-1. 738	1. 00 34. 28
	atom	1973	N	ALA	252	38. 743	24. 782	0. 404	1. 00 31. 45
	atom	1974	CA	ALA	252	39. 446	23. 519	0. 609	1. 00 26. 65
	atom	1975	СВ	ALA	252	40. 392	23. 635	1. 821	1. 00 26. 35
	atom	1976	С	ALA	252	38. 437	22. 422	0. 856	1. 00 23. 26
10	atom	1977	0	ALA	252	38. 566	21. 308	0. 353	1. 00 26. 20
	atom	1978	N	ILE	253	37. 426	22. 762	1. 636	1. 00 20. 70
	atom	1979	CA	ILE	253	36. 392	21. 826	1. 998	1. 00 25. 42
	atom	1980	СВ	ILE	253	35. 603	22. 364	3. 221	1. 00 26. 48
	atom	1981	CG2	ILE	253	34. 194	21. 777	3. 258	1. 00 25. 77
15	atom	1982	CG1	ILE	253	36. 364	22. 012	4. 501	1. 00 23. 51
	atom	1983	CD1	ILE	253	36. 576	23. 185	5. 419	1. 00 19. 45
	atom	1984	С	ILE	253	35. 452	21. 548	0. 829	1. 00 28. 11
	atom	1985	0	ILE	253	34. 935	20. 433	0. 690	1. 00 28. 35
	atom	1986	N	LYS	254	35. 221	22. 555	-0. 010	1. 00 27. 94
20	atom	1987	CA	LYS	254	34. 344	22. 362	-1. 164	1. 00 27. 29
	atom	1988	CB	LYS	254	34. 041	23. 692	-1. 859	1. 00 31. 22
	atom	1989	CG	LYS	254	32. 903	23. 619	-2. 849	1. 00 32. 19
	atom	1990	CD	LYS	254	33. 313	24. 099	-4. 223	1. 00 36. 74
	atom	1991	CE	LYS	254	32. 348	25. 160	−4. 726	1. 00 41. 08
25	atom	1992	NZ	LYS	254	31. 308	24. 585	-5. 610	1. 00 43. 09
	atom	1993	С	LYS	254	35. 079		-2. 117	
	atom	1994	0	LYS	254	34. 535	20. 441	-2. 600	1. 00 26. 31
	atom	1995	N	SER	255	36. 338	21. 794	-2. 353	1. 00 23. 15
	atom	1996	CA	SER	255	37. 185	21. 018	-3. 236	1. 00 25. 37
3 0	atom	1997	CB	SER	255	38. 569	21. 643	-3. 327	1. 00 22. 33
	atom	1998	0G	SER	255	39. 368	20. 833	-4. 169	1. 00 32. 54
	atom	1999	С	SER	255	37. 334		-2. 858	1. 00 24. 84
	atom	2000	0	SER	255	37. 027	18. 666	-3. 672	1. 00 27. 25
	atom	2001	N	LEU	256	37. 802	19. 243	-1. 645	1. 00 17. 04
3 5	atom	2002	CA	LEU	256	37. 973	17. 840	-1. 269	1. 00 15. 83
	atom	2003	CB	LEU	256	38. 584	17. 739	0. 127	1. 00 18. 84

```
1. 00 16. 70
                                                    18.046
                                                               0. 258
                                           40.082
                     CG LEU
                                 256
              2004
      atom
                                                                       1.00 16.41
                                           40.300
                                                     18. 977
                                                               1.445
                     CD1 LEU
                                 256
              2005
      atom
                                           40. 855
                                                               0.457
                                                                       1. 00 10. 37
                                                     16.770
                                 256
                     CD2 LEU
              2006
      atom
                                                              -1.328
                                                                       1.00 13.95
                                           36.635
                                                     17.090
              2007
                     C
                         LEU
                                 256
      atom
                                                     15. 906
                                                              -1. 656
                                                                       1. 00 14. 47
                         LEU
                                 256
                                           36. 570
                     0
              2008
      atom
 5
                                           35. 552
                                                     17. 788
                                                              -1.023
                                                                       1. 00 12. 60
                                 257
              2009
                     N
                         THR
      atom
                                                                       1.00 11.14
                                                              -1.069
                                           34. 250
                                                     17. 151
                     CA
                         THR
                                 257
              2010
      atom
                                                                        1.00 8.15
                                                     18. 104
                                                              -0.623
                                           33. 190
                          THR
                                 257
                     CB
      atom
              2011
                                                                        1. 00 16. 01
                                                     18. 441
                                                               0. 737
                                           33. 436
              2012
                     OG1 THR
                                 257
      atom
                                                                        1.00 2.00
                                                              -0.794
                                                     17. 490
                     CG2 THR
                                 257
                                            31. 814
              2013
      atom
10
                                            33.892
                                                     16.639
                                                              -2. 466
                                                                        1. 00 12. 38
                                 257
                     C
                          THR
              2014
      atom
                                                              -2.603
                                                                        1. 00 13. 28
                                            33. 528
                                                     15. 480
                     0
                          THR
                                 257
              2015
      atom
                                                                        1. 00 15. 08
                                                     17. 501
                                                              -3.488
                                            33. 992
                                 258
              2016
                     N
                          GLU
      atom
                                                                        1.00 16.55
                                            33.660
                                                     17. 129
                                                              -4.881
                                 258
                          GLU
              2017
                     CA
      atom
                                                                        1.00 18.49
                                                              -5. 777
                                                     18. 368
                          GLU
                                 258
                                            33. 467
              2018
                     CB
      atom
15
                                                              -5.396
                                                                        1. 00 12. 86
                                                     19. 334
                                            32. 347
                     CG
                          GLU
                                 258
              2019
      atom
                                                                        1. 00 19. 96
                          GLU
                                 258
                                            30. 980
                                                     18. 902
                                                              -5. 897
                     CD
              2020
      atom
                                                                        1. 00 28. 35
                                                     19.540
                                                              -5. 533
                                            29.970
              2021
                     OE1 GLU
                                 258
      atom
                                                                        1.00 18.70
                                                     17.926
                                                               -6.658
                                            30.892
                     OE2 GLU
                                 258
              2022
      atom
                                                                        1.00 16.06
                                                               -5.535
                                 258
                                            34. 733
                                                     16. 270
              2023
                     C
                          GLU
20
      atom
                                                                        1.00 24.28
                                                               -6.463
                                                     15. 518
                                 258
                                            34. 445
              2024
                     0
                          GLU
      atom
                                                                        1. 00 13. 40
                                                     16. 355
                                                               -5.044
                                 259
                                            35. 961
              2025
                     N
                          ARG
      atom
                                                                        1. 00 15. 24
                                                     15. 608
                                                               -5.652
              2026
                      CA
                          ARG
                                 259
                                            37. 055
      atom
                                                                        1. 00 15. 45
                                                     16. 434
                                                               -5. 616
                                 259
                                            38. 331
                      CB
                          ARG
      atom
               2027
                                                               -6.499
                                                                        1.00 18.00
                                            38. 341
                                                     17.685
                                 259
               2028
                      CG
                          ARG
25
      atom
                                                               -7.330
                                                                        1.00 14.70
                                                     17.646
                                 259
                                            39.610
               2029
                      CD
                          ARG
      atom
                                                               -7.238
                                                                        1. 00 19. 54
                                                     18. 823
                                 259
                                            40. 440
                      NE
                          ARG
      atom
               2030
                                                                        1. 00 23. 21
                                            41. 722
                                                               -7.588
                                  259
                                                      18.841
               2031
                      CZ
                          ARG
      atom
                                                                        1. 00 18. 68
                                                               -8.052
                      NH1 ARG
                                  259
                                            42. 296
                                                      17. 739
               2032
       atom
                                                      19.965
                                                               -7. 500
                                                                        1. 00 26. 81
                                            42. 424
                      NH2 ARG
                                  259
               2033
       atom
30
                                                                         1. 00 15. 76
                                                               -5.062
                      C
                                  259
                                            37. 375
                                                      14. 253
                           ARG
               2034
       atom
                                                                         1.00 16.41
                                                               -5.774
                                            37. 733
                                                      13. 317
                                  259
               2035
                      0
                           ARG
       atom
                                            37. 279
                                                               -3.749
                                                                         1. 00 18. 48
                                                      14. 148
                                  260
                           LEU
       atom
               2036
                      N
                                                                         1.00 14.79
                                                               -3.104
                                            37. 620
                                                      12. 905
               2037
                      CA
                          LEU
                                  260
       atom
                                                               -2.358
                                                                         1. 00 14. 19
                                                      13. 123
               2038
                                  260
                                            38. 926
                      CB
                           LEU
 35
       atom
                                                               -1.181
                                                                         1. 00 13. 57
                                                      12. 280
                                  260
                                            39. 383
                      CG
                           LEU
               2039
       atom
```

```
-1. 632
                                                                         1.00 9.18
                                  260
                                             40. 401
                                                      11. 272
                     CD1 LEU
      atom
              2040
                                             39. 978
                                                      13. 222
                                                               -0.155
                                                                         1. 00 10. 22
                     CD2 LEU
                                  260
              2041
      atom
                                                      12. 315
                                                                -2.210
                                                                         1. 00 13. 96
                     C
                          LEU
                                  260
                                             36. 532
              2042
      atom
                                                                         1.00 9.01
                                             36. 221
                                                      11. 140
                                                               -2. 337
                          LEU
      atom
              2043
                     0
                                  260
                                                               -1.340
                                                                         1. 00 12. 89
                          TYR
                                  261
                                             35. 933
                                                      13. 120
              2044
                     N
      atom
 5
                                                      12. 597
                                                                -0.436
                                                                         1. 00 15. 89
                          TYR
                                  261
                                             34.901
              2045
                     CA
      atom
                                                      13.698
                                                                 0. 526
                                                                          1. 00 13. 43
                          TYR
                                  261
                                             34. 425
              2046
                     CB
      atom
                                                                          1.00 11.40
                                             35. 528
                                                      14. 180
                                                                 1. 445
                     CG
                          TYR
                                  261
              2047
      atom
                                                                 1.761
                                                                          1. 00 7. 86
                     CD1 TYR
                                  261
                                             36.600
                                                      13. 367
              2048
      atom
                                                      13.832
                                                                 2. 555
                                                                          1. 00 13. 56
                     CE1 TYR
                                  261
                                             37. 627
      atom
              2049
10
                                             35. 517
                                                      15. 467
                                                                 1. 947
                                                                          1. 00 13. 43
                     CD2 TYR
                                  261
              2050
      atom
                                                                          1. 00 13. 28
                                             36. 531
                                                      15.934
                                                                 2. 727
              2051
                     CE2 TYR
                                  261
      atom
                                                                 3.032
                                                                          1.00 14.20
                                             37. 583
                                                      15. 121
                     CZ
                          TYR
                                  261
              2052
      atom
                                             38. 567
                                                      15. 619
                                                                 3.845
                                                                          1. 00 18. 77
                     OH
                          TYR
                                  261
              2053
      atom
                                             33. 702
                                                      11. 987
                                                                -1.139
                                                                          1. 00 14. 37
              2054
                     C
                          TYR
                                  261
      atom
15
                                                      10. 903
                                                                -0.791
                                                                          1. 00 13. 68
                                  261
                                             33. 258
              2055
                      0
                          TYR
      atom
                           ILE
                                  262
                                             33. 189
                                                      12.698
                                                                -2. 134
                                                                          1. 00 17. 32
              2056
                      N
      atom
                                                       12. 262
                                                                -2.906
                                                                          1. 00 18. 38
                                  262
                                             32. 035
              2057
                      CA
                           ILE
      atom
                                                      13. 392
                                                                -3.850
                                                                          1.00 24.13
                                  262
                                             31.620
               2058
                      CB
                           ILE
      atom
                                                                          1.00 23.73
                                                                -5.299
                      CG2 ILE
                                  262
                                             31. 733
                                                       12. 967
               2059
20
      atom
                                                                          1.00 24.22
                                             30. 228
                                                       13.869
                                                                -3.464
                      CG1 ILE
                                  262
      atom
               2060
                                             30. 270
                                                       15. 040
                                                                -2.530
                                                                          1. 00 22. 83
                      CD1 ILE
                                  262
               2061
      atom
                                                                -3.698
                                                                          1. 00 17. 72
               2062
                      C
                           ILE
                                  262
                                             32. 279
                                                       10. 981
      atom
                                             31. 361
                                                       10. 208
                                                                -3.945
                                                                          1. 00 23. 83
                                  262
               2063
                           ILE
      atom
                      0
                                  263
                                             33. 522
                                                       10. 750
                                                                -4.089
                                                                          1. 00 14. 02
               2064
                      N
                           GLY
      atom
25
                                             33. 822
                                                        9. 567
                                                                -4.860
                                                                          1. 00 13. 07
                           GLY
                                  263
               2065
                      CA
      atom
                                                                -5.722
                                                                          1. 00 15. 51
                                  263
                                             35. 048
                                                        9.801
                           GLY
               2066
                      C
      atom
                           GLY
                                  263
                                             35. 675
                                                       10.874
                                                                -5. 649
                                                                          1. 00 12. 52
               2067
                      0
      atom
                                                                          1. 00 11. 84
               2068
                           GLY
                                  264
                                             35. 380
                                                        8.808
                                                                -6. 548
      atom
                      N
                                                        8. 912
                                                                -7.408
                                                                          1. 00 10. 59
                           GLY
                                  264
                                             36. 543
               2069
                      CA
      atom
30
                                                                -7.880
                                                                          1. 00 15. 77
                      C
                           GLY
                                  264
                                             37. 030
                                                        7. 554
               2070
      atom
                                                        6. 526
                                                                -7.501
                                                                          1. 00 18. 26
                           GLY
                                  264
                                             36. 468
               2071
                      0
      atom
                                                        7. 522
                                                                -8.739
                                                                          1. 00 16. 69
                                  265
                                             38. 062
               2072
                           PR<sub>0</sub>
                      N
      atom
                                  265
                                             38. 743
                                                        8. 716
                                                                −9. 275
                                                                          1. 00 21. 57
               2073
                      CD.
                           PR0
      atom
                                                        6. 295
                                                                -9. 283
                                                                          1. 00 15. 40
               2074
                      CA
                           PR<sub>0</sub>
                                  265
                                             38. 642
       atom
35
                                                        6. 796 -10. 403
                                                                          1. 00 15. 76
                                  265
               2075
                      CB
                           PR<sub>0</sub>
                                             39. 563
       atom
```

```
8. 134 -10. 015
                                                                         1.00 15.43
                                            39.950
              2076 CG
                          PR<sub>0</sub>
                                 265
      atom
                                                                         1. 00 15. 52
                     C
                          PR0
                                 265
                                            39. 414
                                                       5. 482
                                                               -8.253
              2077
      atom
                          PR0
                                 265
                                            40. 034
                                                       6.044
                                                               -7. 363
                                                                         1. 00 11. 46
              2078
                     0
      atom
                                                               -8.425
                                                                         1. 00 19. 24
                                            39. 404
                                                       4. 161
      atom
              2079
                     N
                          LEU
                                 266
                          LEU
                                 266
                                            40.088
                                                       3. 242
                                                               -7. 522
                                                                         1. 00 19. 03
              2080
                     CA
      atom
 5
                                                               -7.029
                                                                         1.00 19.47
              2081
                     CB
                          LEU
                                 266
                                            39.097
                                                       2. 180
      atom
                                                               -6.208
                                                                         1. 00 23. 78
                          LEU
                                            37. 951
                                                       2. 784
      atom
              2082
                     CG
                                 266
                                            36. 662
                                                       2. 020
                                                               -6.470
                                                                         1. 00 16. 22
              2083
                     CD1 LEU
                                 266
      atom
                     CD2 LEU
                                 266
                                            38. 329
                                                       2. 771
                                                               -4.716
                                                                         1. 00 22. 20
      atom
              2084
              2085
                     C
                          LEU
                                 266
                                            41. 324
                                                       2. 555
                                                               <del>-</del>8. 118
                                                                         1. 00 18. 52
      atom
10
                                            41. 220
                                                               -8.939
                                                                         1. 00 11. 92
                          LEU
                                 266
                                                       1. 656
              2086
                     0
      atom
                                                                         1. 00 23. 15
              2087
                     N
                          THR
                                 267
                                            42. 502
                                                       2. 964
                                                               −7. 662
      atom
                                                               -8. 146
                                                                         1. 00 26. 03
                          THR
                                 267
                                            43. 746
                                                       2. 385
              2088
                     CA
      atom
                                            44. 731
                                                               -8. 442
                                                                         1. 00 26. 23
                     CB
                          THR
                                 267
                                                       3. 515
              2089
      atom
                                                                         1. 00 22. 47
              2090
                     OG1 THR
                                 267
                                            44. 023
                                                       4. 584
                                                               -9.085
      atom
15
                                                                         1. 00 22. 46
                                                       3. 025
                                                               -9.330
              2091
                     CG2 THR
                                  267
                                            45. 871
      atom
              2092
                     C
                          THR
                                  267
                                            44. 341
                                                       1. 402
                                                               −7. 111
                                                                         1. 00 28. 57
      atom
                          THR
                                            44. 317
                                                       1. 685
                                                               -5.907
                                                                         1.00 34.94
      atom
              2093
                     0
                                  267
                          ASN
                                            44. 854
                                                       0. 257
                                                               -7.574
                                                                         1. 00 24. 49
              2094
                                  268
                     N
      atom
                          ASN
                                  268
                                            45. 447
                                                      -0.741
                                                                -6.682
                                                                         1. 00 25. 47
              2095
                     CA
      atom
20
                                                               -7. 298
                                                                         1. 00 26. 74
                          ASN
                                             45. 309
                                                      -2. 144
      atom
               2096
                     CB
                                  268
                                                                         1. 00 26. 59
                          ASN
                                  268
                                             46. 118
                                                      -2. 317
                                                               -8. 567
               2097
                     CG
      atom
               2098
                     OD1 ASN
                                  268
                                             47. 108
                                                      -1.631
                                                                -8.789
                                                                         1. 00 31. 14
      atom
                                                                         1. 00 23. 96
                      ND2 ASN
                                  268
                                             45. 697
                                                      -3.244
                                                                -9.403
               2099
      atom
                                  268
                                                      -0.448
                                                               -6.321
                                                                         1. 00 24. 45
               2100
                     C
                          ASN
                                             46. 916
      atom
25
               2101
                                                       0.641
                                                                -6.576
                                                                         1. 00 25. 01
                      0
                          ASN
                                  268
                                             47. 415
      atom
                                                                -5.709
                                                                         1. 00 25. 69
                          SER
                                  269
                                             47. 609
                                                      -1.402
               2102
                     N
      atom
                                  269
                                                      -1. 182
                                                                -5. 344
                                                                         1. 00 26. 70
      atom
               2103
                      CA
                          SER
                                             49. 019
               2104
                      CB
                          SER
                                  269
                                             49. 531
                                                      -2. 304
                                                                -4. 423
                                                                         1. 00 23. 84
      atom
                                  269
                                                      -3.591
                                                                -4.876
                                                                         1. 00 24. 85
               2105
                      0G
                          SER
                                             49. 137
      atom
30
                           SER
                                  269
                                             49. 941
                                                      -1.080
                                                                -6.570
                                                                         1. 00 27. 41
               2106
                      C
      atom
                                                                         1. 00 24. 61
                                  269
                                             50.966
                                                      -0.383
                                                                -6.544
               2107
                      0
                           SER
      atom
                                                      -1.759
                                                                         1. 00 27. 65
                                  270
                                             49. 560
                                                                -7. 646
               2108
                      N
                          LYS
      atom
                                  270
                                             50. 350
                                                      -1. 756
                                                                -8. 877
                                                                         1. 00 34. 24
               2109
                      CA
                          LYS
      atom
                                                                -9. 427
                                                                          1. 00 38. 14
               2110
                      CB
                          LYS
                                  270
                                             50. 439
                                                      -3.172
35
      atom
                                                      -4.202
                                                                -8.453
                                                                         1. 00 41. 52
                      CG
                          LYS
                                  270
                                             49. 904
               2111
      atom
```

```
-7.996
                                                                       1.00 39.96
                                           50. 995
                                                     -5. 139
                     CD
                         LYS
                                 270
      atom
              2112
                                                                        1. 00 41. 32
                         LYS
                                 270
                                           50. 755
                                                     -6.511
                                                              -8.584
              2113
                     CE
      atom
                                                                        1. 00 43. 81
                         LYS
                                 270
                                           49. 453
                                                     -6.575
                                                              -9.308
              2114
                     NZ
      atom
                                                                        1. 00 32. 73
                                           49. 826
                                                     -0.827 -9.965
      atom
              2115
                     C
                          LYS
                                 270
                                                                        1. 00 32. 11
                          LYS
                                 270
                                           49. 728
                                                     -1. 225 -11. 122
              2116
                     0
 5
      atom
                                                      0.400
                                                                        1. 00 32. 07
                     N
                          GLY
                                 271
                                           49. 483
                                                             -9. 569
              2117
      atom
                                                      1. 414 -10. 486
                                                                        1. 00 27. 34
                                 271
                                           48. 991
              2118
                     CA
                          GLY
      atom
                                                                        1.00 26.74
                                                      1. 148 -11. 414
                          GLY
                                 271
                                           47. 811
              2119
                     C
      atom
                          GLY
                                           47. 401
                                                      2. 070 -12. 131
                                                                        1. 00 29. 62
              2120
                     0
                                 271
      atom
                                                                        1. 00 16. 78
              2121
                          GLN
                                 272
                                           47. 266
                                                     -0. 065 -11. 434
      atom
                     N
10
                                                     -0. 367 -12. 298
                                                                        1. 00 22. 50
                          GLN
                                 272
                                            46. 130
              2122
                     CA
      atom
                                                                        1. 00 25. 20
              2123
                     CB
                          GLN
                                 272
                                            46.006
                                                     -1. 879 -12. 461
      atom
                                                                        1.00 28.05
                                                     -2. 350 -13. 607
                                 272
                                            45. 118
              2124
                     CG
                          GLN
      atom
                                                                        1.00 32.35
                          GLN
                                 272
                                            45. 018
                                                     -3. 871 -13. 633
              2125
                     CD
      atom
                                                                        1. 00 33. 79
              2126
                     OE1 GLN
                                 272
                                            44. 301
                                                     -4. 474 -14. 450
15
      atom
                                                                        1. 00 31. 21
                     NE2 GLN
                                                     -4. 500 -12. 724
              2127
                                 272
                                            45. 741
      atom
                     C
                                 272
                                            44. 817
                                                      0. 220 -11. 742
                                                                        1. 00 27. 23
              2128
                          GLN
      atom
                                                                        1.00 29.76
                                 272
                                            44. 737
                                                      0.578 - 10.560
      atom
              2129
                     0
                          GLN
                                                                        1.00 26.20
                                            43. 786
                                                      0.316 - 12.586
                          ASN
                                 273
              2130
                     N
      atom
                                                                        1.00 23.35
                          ASN
                                 273
                                            42. 499
                                                      0.884 - 12.162
              2131
                     CA
      atom
20
                                                                        1. 00 30. 32
                          ASN
                                 273
                                            42. 012
                                                      1. 888 -13. 211
      atom
              2132
                     CB
                                                      2. 782 -12. 692
                                                                        1. 00 38. 52
                                 273
                                            40. 898
              2133
                     CG
                          ASN
      atom
                                                                        1. 00 38. 61
              2134
                     OD1 ASN
                                 273
                                            39. 724
                                                      2. 603 -13. 043
      atom
                                                                        1. 00 35. 47
                                 273
                                            41. 258
                                                       3. 748 -11. 842
              2135
                     ND2 ASN
      atom
                                 273
                                            41. 450
                                                     -0. 196 -11. 913
                                                                        1.00 23.09
              2136
                     C
                          ASN
      atom
25
                                                                        1. 00 25. 78
                                            41. 161
                                                     -1. 012 -12. 788
              2137
                     0
                          ASN
                                 273
      atom
                                                     -0. 186 -10. 724
                                                                        1. 00 23. 19
                                 274
                                            40. 859
              2138
                     N
                          CYS
      atom
                                 274
                                            39. 897
                                                     -1. 224 -10. 330
                                                                        1. 00 25. 74
      atom
              2139
                     CA
                          CYS
              2140
                     CB
                          CYS
                                 274
                                            40. 167
                                                     -1. 645 -8. 878
                                                                        1.00 24.20
      atom
                                                                        1. 00 32. 90
                                 274
                                                     -2. 465 -8. 623
              2141
                      SG
                          CYS
                                            41. 736
30
      atom
                                                                        1.00 26.08
                     C
                          CYS
                                 274
                                            38. 408
                                                     -0. 941 -10. 453
               2142
      atom
                                                                        1. 00 28. 31
                                 274
                                            37. 586
                                                     -1. 876 -10. 466
               2143
                     0
                          CYS
      atom
                                                                        1. 00 23. 19
                                                       0. 335 -10. 517
                          GLY
                                 275
                                            38. 050
               2144
                     N
      atom
                                            36. 646
                                                       0. 672 -10. 599
                                                                        1. 00 16. 16
               2145
                     CA
                          GLY
                                 275
      atom
                                                                        1. 00 17. 69
                     C
                          GLY
                                 275
                                            36. 427
                                                       2. 072 -10. 091
      atom
               2146
35
                                                                        1. 00 19. 74
                          GLY
                                 275
                                            37. 376
                                                       2. 835
                                                              -9. 931
               2147
                     0
      atom
```

```
1.00 19.21
                                                              -9. 835
                                            35. 173
                                                      2. 416
              2148
                     N
                          TYR
                                 276
      atom
                                                                        1.00 16.79
                                                              -9.355
                          TYR
                                 276
                                            34. 836
                                                       3. 739
      atom
              2149
                     CA
                                            34.070
                                                       4. 493 -10. 431
                                                                        1. 00 17. 22
                          TYR
                                 276
              2150
                     CB
      atom
                                                                        1.00 19.00
                                                       5. 978 -10. 351
              2151
                     CG
                          TYR
                                 276
                                            34. 243
      atom
                                            35. 434
                                                       6. 571 -10. 743
                                                                        1. 00 22. 14
                     CD1 TYR
                                 276
              2152
      atom
 5
                                            35. 615
                                                       7. 941 -10. 648
                                                                        1. 00 19. 36
                     CE1 TYR
                                 276
              2153
      atom
                                                                        1. 00 14. 77
                                                       6. 798
                                                              -9. 852
                     CD2 TYR
                                 276
                                            33. 226
              2154
      atom
                                                              -9. 754
                                                                        1. 00 10. 07
                                            33. 397
                                                       8. 170
                     CE2 TYR
                                 276
      atom
              2155
                                                       8. 732 -10. 155
                                                                        1. 00 16. 49
                     CZ
                          TYR
                                 276
                                            34. 597
              2156
      atom
                                            34. 787
                                                     10. 097 -10. 115
                                                                         1. 00 22. 80
              2157
                     OH
                          TYR
                                 276
      atom
10
                                                                         1. 00 22. 07
                                            34.011
                                                       3. 693
                                                              -8. 076
                          TYR
                                 276
              2158
                     C
      atom
                                                                         1.00 16.49
                                            33. 140
                                                       2.816
                                                               -7. 904
                          TYR
                                 276
              2159
                     0
      atom
                                                                         1. 00 22. 20
                                            34. 286
                                                       4. 661
                                                               -7.193
              2160
                          ARG
                                 277
      atom
                                                                         1.00 19.05
                                                               -5. 896
                                            33. 605
                                                       4. 779
                          ARG
                                 277
      atom
              2161
                     CA
                                            34. 646
                                                       4. 965
                                                               -4. 796
                                                                         1. 00 16. 38
              2162
                     CB
                          ARG
                                 277
      atom
15
                                                               -3.422
                                                                         1. 00 13. 13
                                 277
                                            34. 065
                                                       5. 125
              2163
                     CG
                          ARG
      atom
                                                       5. 349
                                                               -2.433
                                                                         1. 00 12. 73
                                  277
                                            35. 184
              2164
                     CD
                          ARG
      atom
                                                       6.761
                                                               -2.171
                                                                         1. 00 10. 46
              2165
                     NE
                          ARG
                                  277
                                            35. 316
      atom
                                                               -2.699
                                                                         1.00 13.10
                                            36. 252
                                                       7. 522
                          ARG
                                  277
              2166
                     CZ
      atom
                                            37. 155
                                                       6. 999
                                                               -3.524
                                                                         1. 00 19. 62
                     NH1 ARG
                                  277
              2167
20
      atom
                                            36. 262
                                                                         1. 00 11. 60
                                                               -2.428
              2168
                     NH2 ARG
                                  277
                                                       8.811
      atom
                                                                         1.00 16.53
                                                               -5. 812
                          ARG
                                  277
                                            32. 587
                                                       5. 927
              2169
                     C
      atom
                                  277
                                            32. 871
                                                       7.046
                                                               -6.231
                                                                         1. 00 13. 19
              2170
                     0
                          ARG
      atom
                                                                         1.00 11.39
                                                               -5.259
                                  278
                                            31. 412
                                                       5. 643
      atom
              2171
                      N
                          ARG
                                                       6.666
                                                               -5.109
                                                                         1. 00 17. 01
                                  278
                                            30. 382
              2172
                          ARG
                      CA
25
      atom
                                                       6. 436
                                                               -6.126
                                                                         1. 00 15. 88
                          ARG
                                  278
                                            29. 261
              2173
                      CB
      atom
                                            29. 617
                                                                         1. 00 25. 88
                                                       6.850
                                                               −7. 545
                                  278
      atom
              2174
                      CG
                          ARG
                                                       6. 259
                                                               -8. 557
                                                                         1.00 31.56
               2175
                      CD
                          ARG
                                  278
                                            28. 637
      atom
                                            28.891
                                                       6. 737
                                                               -9.914
                                                                         1. 00 38. 90
               2176
                      NE
                          ARG
                                  278
      atom
                                                                         1.00 46.20
                                                       5. 959 -10. 918
                                            29. 297
                      CZ
                          ARG
                                  278
30
      atom
               2177
                                             29. 498
                                                       4. 657 -10. 721
                                                                         1. 00 40. 83
                                  278
               2178
                      NH1 ARG
      atom
                                                       6. 485 -12. 124
                                                                         1. 00 44. 92
               2179
                      NH2 ARG
                                  278
                                             29. 501
      atom
                                                       6. 709 -3. 678
                                                                         1. 00 18. 33
                                  278
                                             29. 802
      atom
               2180
                      C
                          ARG
                                                       7. 363
                                                               -3.413
                                                                         1. 00 14. 86
                          ARG
                                  278
                                             28. 791
      atom
               2181
                      0
                                                       5. 988
                                                               -2.763
                                                                         1. 00 18. 74
               2182
                      N
                          CYS
                                  279
                                             30. 443
35
      atom
                                                                         1.00 20.34
                                                       5. 951
                                                               -1.372
                          CYS
                                  279
                                             30. 013
      atom
               2183
                      CA
```

	atom	2184	СВ	CYS	279	29. 734	4. 521	-0. 910	1. 00 13. 54
	atom	2185	SG	CYS	279	31. 032	3. 386	-1. 400	1. 00 11. 81
	atom	2186	С	CYS	279	31. 158	6. 530	-0. 580	1. 00 19. 14
	atom	2187	0	CYS	279	31. 995	7. 229	-1. 131	1. 00 18. 85
5	atom	2188	N	ARG	280	31. 204	6. 230	0. 708	1. 00 20. 55
	atom	2189	CA	ARG	280	32. 266	6. 765	1. 551	1. 00 19. 72
	atom	2190	СВ	ARG	280	31. 760	6. 890	2. 994	1. 00 17. 16
	atom	2191	CG	ARG	280	32. 765	6. 504	4. 033	1. 00 18. 71
	atom	2192	CD	ARG	280	32. 721	7. 441	5. 217	1. 00 21. 86
10	atom	2193	NE	ARG	280	32. 610	8. 844	4. 846	1. 00 12. 51
	atom	2194	CZ	ARG^+	280	31. 542	9. 602	5. 089	1. 00 16. 04
	atom	2195	NH1	ARG	280	30. 483	9. 096	5. 697	1. 00 10. 02
	atom	2196	NH2	ARG	280	31. 543	10. 884	4. 738	1. 00 16. 85
	atom	2197	C	ARG	280	33. 534	5. 924	1. 507	1. 00 17. 65
15	atom	2198	0	ARG	280	33. 477	4. 698	1. 508	1. 00 16. 85
	atom	2199	N	ALA	281	34. 673	6. 602	1. 461	1. 00 19. 88
	atom	2200	CA	ALA	281	35. 978	5. 943	1. 465	1. 00 20. 82
	atom	2201	CB	ALA	281	37. 025	6. 809	0. 748	1. 00 17. 70
	atom	2202	C	ALA	281	36. 359	5. 788	2. 933	1. 00 20. 37
20	atom	2203	0	ALA	281	36. 121	6. 686	3. 730	1. 00 17. 90
	atom	2204	N	SER	282	36. 964	4. 658	3. 275	1. 00 23. 63
	atom	2205	CA	SER	282	37. 369	4. 377	4. 643	1. 00 24. 68
	atom	2206	CB	SER	282	37. 569	2. 883	4. 808	1. 00 28. 10
	atom	2207	0G	SER	282	38. 795	2. 513	4. 200	1. 00 34. 10
25	atom	2208	С	SER	282	38. 640	5. 071	5. 121	1. 00 22. 98
	atom	2209	0	SER	282	38. 854	5. 217	6. 322	1. 00 24. 18
	atom	2210	N	GLY	283	39. 491	5. 492	4. 200	1. 00 22. 59
	atom	2211	CA	GLY	283	40. 740	6. 108	4. 625	1. 00 15. 51
	atom	2212	С	GLY	283	40. 877	7. 601	4. 545	1. 00 14. 39
3 0	atom	2213	0	GLY	283	41. 999	8. 113	4. 428	1. 00 19. 94
	atom	2214	N	VAL	284	39. 763	8. 316	4. 625	1. 00 12. 87
	atom	2215	CA	VAL	284	39. 817	9. 774	4. 547	1. 00 16. 46
	atom	2216	CB	VAL	284	38. 707	10. 334	3. 625	1. 00 18. 23
	atom	2217		VAL	284	39. 306	10. 638	2. 256	1. 00 15. 09
3 5	atom	2218		VAL	284	37. 548	9. 344	3. 526	1. 00 15. 13
	atom	2219	C	VAL	284	39. 698	10. 370	5. 935	1. 00 16. 16

	atom	2220	0	VAL	284	39. 365	9. 654	6. 873	1. 00 21. 25
	atom	2221	N	LEU	285	39. 976	11. 662	6. 085	1. 00 14. 54
	atom	2222	CA	LEU	285	39. 925	12. 283	7. 419	1. 00 18. 17
	atom	2223	CB	LEU	285	40. 591	13. 671	7. 397	1. 00 11. 77
5	atom	2224	CG	LEU	285	40. 737	14. 212	8. 834	1. 00 14. 87
3	atom	2225	CD1		285	41. 712	13. 349	9. 575	1. 00 11. 35
	atom	2226	CD2		285	41. 217	15. 638	8. 873	1. 00 11. 98
	atom	2227	C	LEU	285	38. 514	12. 438	8. 003	1. 00 18. 78
	atom	2228	0	LEU	285	38. 289	12. 278	9. 209	1. 00 19. 14
10	atom	2229	N	THR	286	37. 579	12. 769	7. 122	1. 00 16. 92
	atom	2230	CA	THR	286	36. 196	13. 021	7. 463	1. 00 8. 41
	atom	2231	СВ	THR	286	35. 523	13. 887	6. 360	1. 00 11. 85
	atom	2232	0G1	THR	286	35. 864	13. 329	5. 089	1. 00 11. 25
	atom	2233		THR	286	35. 980	15. 366	6. 408	1. 00 3. 47
15	atom	2234	С	THR	286	35. 373	11. 752	7. 600	1. 00 8. 58
	atom	2235	0	THR	286	34. 179	11. 830	7. 885	1. 00 6. 30
	atom	2236	N	THR	287	35. 974	10. 578	7. 437	1. 00 9. 98
	atom	2237	CA	THR	287	35. 132	9. 384	7. 502	1. 00 14. 51
	atom	2238	CB	THR	287	35. 869	8. 126	6. 964	1. 00 11. 97
20	atom	2239	0G1	THR	287	35. 300	6. 948	7. 537	1. 00 16. 98
	atom	2240	CG2	THR	287	37. 317	8. 174	7. 251	1. 00 16. 02
	atom	2241	С	THR	287	34. 472	9. 109	8. 858	1. 00 14. 94
	atom	2242	0	THR	287	33. 288	8. 733	8. 922	1. 00 17. 04
	atom	2243	N	SER	288	35. 214	9. 323	9. 937	1. 00 15. 88
25	atom	2244	CA	SER	288	34. 672	9. 123	11. 291	1. 00 15. 93
	atom	2245	CB	SER	288	35. 797	9. 242	12. 319	1. 00 14. 91
	atom	2246	0G	SER	288	35. 262	9. 346	13. 595	1. 00 17. 41
	atom	2247	С	SER	288	33. 593	10. 172	11. 602	1. 00 13. 04
	atom	2248	0	SER	288	32. 439	9. 844	11. 871	1. 00 12. 73
3 0	atom	2249	N	CYS	289	33. 983	11. 438	11. 559	1. 00 7. 29
	atom	2250	CA	CYS	289	33. 046	12. 511	11. 836	1. 00 10. 66
	atom	2251	CB	CYS	289	33. 793	13. 851	11. 834	1. 00 5. 96
	atom	2252	SG	CYS	289	32. 783	15. 279	11. 493	1. 00 22. 59
	atom	2253	С	CYS	289	31. 863	12. 527	10. 846	1. 00 12. 55
3 5	atom	2254	0	CYS	289	30. 734	12. 875	11. 212	1. 00 14. 62
	atom	2255	N	GLY	290	32. 127	12. 168	9. 591	1. 00 14. 52

	atom	2256	CA	GLY	290	31. 074	12. 120	8. 590	1. 00 9. 51
	atom	2257	С	GLY	290	30. 057	11. 040	8. 936	1. 00 14. 36
	atom	2258	0	GLY	290	28. 852	11. 313	9. 001	1. 00 13. 85
	atom	2259	N	ASN	291	30. 524	9. 813	9. 168	1. 00 10. 21
5	atom	2260	CA	ASN	291	29. 611	8. 721	9. 508	1. 00 13. 14
	atom	2261	CB	ASN	291	30. 372	7. 399	9. 663	1. 00 12. 39
	atom	2262	CG	ASN	291	30. 742	6. 787	8. 343	1. 00 16. 70
	atom	2263	0D1	ASN	291	30. 444	7. 334	7. 291	1. 00 19. 76
	atom	2264	ND2	ASN	291	31. 398	5. 645	8. 388	1. 00 14. 60
10	atom	2265	C	ASN	291	28. 840	9. 007	10. 803	1. 00 13. 64
	atom	2266	0	ASN	291	27. 672	8. 669	10. 912	1. 00 16. 48
	atom	2267	N	THR	292	29. 498	9. 615	11. 787	1. 00 13. 64
	atom	2268	CA	THR	292	28. 829	9. 926	13. 033	1. 00 11. 88
	atom	2269	CB	THR	292	29. 814	10. 420	14. 092	1. 00 11. 39
15	atom	2270	0G1	THR	292	30. 878	9. 460	14. 247	1. 00 9. 50
	atom	2271	CG2	THR	292	29. 099	10. 572	15. 406	1. 00 2. 48
	atom	2272	С	THR	292	27. 731	10. 956	12. 834	1. 00 12. 72
	atom	2273	0	THR	292	26. 619	10. 785	13. 354	1. 00 9. 10
	atom	2274	N	LEU	293	28. 030	11. 997	12. 060	1. 00 7. 16
20	atom	2275	CA	LEU	293	27. 045	13. 036	11. 767	1. 00 10. 97
	atom	2276	CB	LEU	293	27. 704	14. 195	11. 018	1. 00 8. 15
	atom	2277	CG	LEU	293	28. 403	15. 187	11. 956	1. 00 18. 61
	atom	2278		LEU	293	29. 564	15. 857	11. 252	1. 00 14. 67
	atom	2279		LEU	293	27. 400	16. 228	12. 448	1. 00 18. 24
25	atom	2280	С	LEU	293	25. 879	12. 498	10. 927	1. 00 11. 98
	atom	2281	0	LEU	293	24. 693	12. 837	11. 143	1. 00 10. 31
	atom	2282	N	THR	294	26. 218	11. 644	9. 973	1. 00 9. 34
	atom	2283	CA	THR	294	25. 218	11. 088	9. 078	1. 00 13. 14
	atom	2284	CB	THR	294	25. 932	10. 501	7. 830	1. 00 17. 76
3 0	atom	2285	0G1		294	26. 584	11. 576	7. 136	1. 00 9. 54
	atom	2286		THR	294	24. 952	9. 770	6. 888	1. 00 13. 10
	atom	2287	C	THR	294	24. 325	10. 051	9. 775	1. 00 13. 78
	atom	2288	0	THR	294	23. 103	10. 068	9. 612	1. 00 12. 50
	atom	2289	N	CYS	295	24. 927	9. 183	10. 586	1. 00 12. 96
3 5	atom	2290	CA	CYS	295	24. 158	8. 164	11. 297	1. 00 15. 53
	atom	2291	CB	CYS	295	25. 083	7. 216	12. 054	1. 00 14. 80

	atom	2292	SG	CYS	295	24. 228	5. 909	12. 939	1. 00 21. 83
	atom	2293	С	CYS	295	23. 237	8. 852	12. 279	1. 00 15. 64
	atom	2294	0	CYS	295	22. 123	8. 424	12. 506	1. 00 19. 96
	atom	2295	N	TYR	296	23. 714	9. 945	12. 846	1. 00 16. 53
5	atom	2296	CA	TYR	296	22. 944	10. 688	13. 808	1. 00 13. 09
	atom	2297	CB	TYR	296	23. 831	11. 751	14. 460	1. 00 19. 53
	atom	2298	CG	TYR	296	23. 101	12. 750	15. 335	1. 00 23. 83
	atom	2299	CD1	TYR	296	22. 977	12. 549	16. 705	1. 00 20. 52
	atom	2300	CE1	TYR	296	22. 251	13. 432	17. 495	1. 00 23. 16
10	atom	2301	CD2	TYR	296	22. 485	13. 865	14. 774	1. 00 22. 40
	atom	2302	CE2	TYR	296	21. 763	14. 742	15. 543	1. 00 25. 16
	atom	2303	CZ	TYR	296	21. 639	14. 525	16. 901	1. 00 26. 73
	atom	2304	OH	TYR	296	20. 878	15. 398	17. 644	1. 00 29. 21
	atom	2305	C	TYR	296	21. 727	11. 326	13. 175	1. 00 13. 13
15	atom	2306	0	TYR	296	20. 627	11. 241	13. 705	1. 00 19. 26
	atom	2307	N	LEU	297	21. 930	11. 965	12. 037	1. 00 15. 33
	atom	2308	CA	LEU	297	20. 861	12. 651	11. 329	1. 00 8. 06
	atom	2309	CB	LEU	297	21. 478	13. 414	10. 167	1. 00 4. 00
	atom	2310	CG	LEU	297	20. 657	13. 832	8. 973	1. 00 5. 36
20	atom	2311	CD1	LEU	297	19. 567	14. 751	9. 449	1. 00 2. 30
	atom	2312	CD2	LEU	297	21. 600	14. 508	7. 935	1. 00 2. 00
	atom	2313	C	LEU	297	19. 795	11. 679	10. 854	1. 00 10. 56
	atom	2314	0	LEU	297	18. 602	11. 927	10. 989	1. 00 8. 08
	atom	2315	N	LYS	298	20. 224	10. 554	10. 306	1. 00 9. 28
25	atom	2316	CA	LYS	298	19. 259	9. 584	9. 843	1. 00 14. 54
	atom	2317	CB	LYS	298	19. 959	8. 524	8. 975	1. 00 14. 39
	atom	2318	CG	LYS	298	20. 284	9. 041	7. 564	1. 00 14. 80
	atom	2319	CD	LYS	298	21. 047	8. 018	6. 741	1. 00 9. 15
	atom	2320	CE	LYS	298	21. 993	8. 691	5. 772	1. 00 6. 39
3 0	atom	2321	NZ	LYS	298	22. 398	7. 721	4. 710	1. 00 12. 57
	atom	2322	C	LYS	298	18. 526	8. 926	11. 022	1. 00 17. 93
	atom	2323	0	LYS	298	17. 302	8. 706	10. 976	1. 00 14. 55
	atom	2324	N	ALA	299	19. 275	8. 622	12. 081	1. 00 13. 25
	atom	2325	CA	ALA	299	18. 682	7. 971	13. 224	1. 00 15. 80
3 5	atom	2326	CB	ALA	299	19. 760	7. 440	14. 140	1. 00 11. 84
	atom	2327	С	ALA	299	17. 746	8. 923	13. 968	1. 00 18. 33

```
1.00 17.79
                                                       8. 507
                                                               14. 476
                                            16.701
              2328
                          ALA
                                 299
                     0
      atom
                                                                        1. 00 18. 37
                                            18.098
                                                     10. 203
                                                               14. 005
                                 300
                          SER
      atom
              2329
                     N
                                            17. 250
                                                      11. 173
                                                               14. 693
                                                                         1. 00 19. 72
                                 300
              2330
                     CA
                          SER
      atom
                                                                         1. 00 15. 36
                                                      12. 537
                                                               14. 736
              2331
                     CB
                          SER
                                 300
                                            17. 917
      atom
                                            18.855
                                                      12. 587
                                                               15. 777
                                                                         1. 00 20. 47
                                 300
              2332
                     0G
                          SER
      atom
 5
                                                                         1.00 17.03
                                            15. 917
                                                      11. 296
                                                               13.973
                     C
                          SER
                                 300
              2333
      atom
                                                               14. 579
                                                                         1.00 15.98
                                                      11. 152
                          SER
                                 300
                                            14.853
              2334
                     0
      atom
                                                               12.673
                                                                         1. 00 16. 11
                                            15. 997
                                                      11. 565
                                 301
      atom
              2335
                     N
                          ALA
                                                      11. 703
                                                               11. 831
                                                                         1. 00 12. 11
                          ALA
                                 301
                                            14. 818
              2336
                     CA
      atom
                                            15. 234
                                                      12. 062
                                                               10. 399
                                                                         1. 00 14 67
              2337
                     CB
                          ALA
                                 301
      atom
10
                                                               11. 859 1. 00 5. 18
                                            14.048
                                                      10.394
                                 301
              2338
                          ALA
      atom
                     C
                                                                         1.00
                                                                               7. 90
                                            12.829
                                                      10.375
                                                               11.892
                          ALA
                                 301
              2339
                     0
      atom
                                                                         1. 00
                                                                                8. 95
                                            14. 762
                                                       9. 285
                                                               11.869
                          ALA
                                  302
              2340
      atom
                                                                         1. 00 10. 58
                                                       7. 997
                                                               11. 923
                                 302
                                            14. 083
                          ALA
      atom
              2341
                     CA
                                                                         1. 00 2. 00
                                            15.068
                                                       6.887
                                                                11. 656
              2342
                      CB
                          ALA
                                 302
      atom
15
                                                                         1.00 14.11
                                                               13. 276
                                  302
                                            13. 351
                                                       7. 764
              2343
                     C
                          ALA
      atom
                                            12. 315
                                                       7.102
                                                               13. 310
                                                                         1. 00 9. 62
                                  302
                     0
                          ALA
              2344
      atom
                                                       8.308
                                                                14. 373
                                                                         1. 00 18. 06
                          CYS
                                  303
                                            13.885
              2345
                      N
      atom
                                                                         1. 00 23. 37
                                                                15. 705
                                                       8. 163
                                  303
                                            13. 263
               2346
                      CA
                          CYS
      atom
                                                       8. 725
                                                                16. 803
                                                                         1.00 21 74
                          CYS
                                  303
                                             14. 190
                      CB
20
      atom
               2347
                                                                         1. 00 27. 25
                                                       7.631
                                                                17. 351
               2348
                      SG
                          CYS
                                  303
                                             15. 531
      atom
                                                                         1.00 26.18
                                                       8. 925
                                                                15. 742
                           CYS
                                  303
                                             11. 917
               2349
                      C
      atom
                                                                16. 285
                           CYS
                                  303
                                             10.903
                                                       8. 446
                                                                         1. 00 23. 74
               2350
                      0
      atom
                                                                         1. 00 22. 67
                                                      10. 122
                                                                15. 161
                                  304
                                             11. 929
               2351
                      N
                           ARG
      atom
                                                      10.940
                                                                15.097
                                                                         1.00 22.19
                                  304
                                             10. 747
                           ARG
               2352
                      CA
25
      atom
                                                                         1.00 25.32
                                                      12. 306
                                                                14. 503
                           ARG
                                  304
                                             11.099
               2353
                      CB
      atom
                                                                         1. 00 16. 91
                                                      13. 063
                                                                15. 254
                                  304
                                             12. 197
       atom
               2354
                      CG
                           ARG
                                                      14. 548
                                                                14. 889
                                                                         1. 00 15. 19
               2355
                      CD
                           ARG
                                  304
                                             12. 192
       atom
                                                                15. 499
                                  304
                                             13. 299
                                                      15. 295
                                                                         1. 00 19. 62
               2356
                      NE
                           ARG
       atom
                                                                         1.00 22.51
                                                                15. 392
                                             13. 467
                                                      16. 616
                      CZ
                           ARG
                                  304
       atom
               2357
30
                                                      17. 339
                                                                14.690
                                                                         1. 00 23. 10
                                  304
                                             12. 595
               2358
                      NH1 ARG
       atom
                                                      17. 228
                                                                         1.00 11.90
                                                                16. 012
                      NH2 ARG
                                  304
                                             14. 483
               2359
       atom
                                                                14. 256
                                                                          1. 00 26. 83
                                                      10. 226
                                  304
                                              9. 677
       atom
               2360
                      C
                           ARG
                                                      10. 394
                                                                14. 489
                                                                          1. 00 25. 97
                           ARG
                                  304
                                              8. 476
               2361
                      0
       atom
                                                                          1.00 30.84
                                             10.106
                                                        9.419
                                                                13. 290
               2362
                      N
                           ALA
                                  305
       atom
35
                                                                          1. 00 34. 55
                                                        8. 683
                                                                12. 449
                                  305
                                              9. 158
               2363
                      CA
                           ALA
       atom
```

									1 00 05 05
	atom	2364		ALA	305	9. 898	7. 809	11. 444	1. 00 35. 65
	atom	2365	C	ALA	305	8. 225	7. 821	13. 299	1. 00 37. 13
	atom	2366	0	ALA	305	7. 190	7. 358	12. 815	1. 00 37. 73
	atom	2367	N	ALA	306	8. 592	7. 610	14. 562	1. 00 38. 22
5	atom	2368	CA	ALA	306	7. 762	6. 824	15. 474	1. 00 36. 67
	atom	2369	CB	ALA	306	8. 310	5. 422	15. 583	1. 00 35. 11
	atom	2370	C	ALA	306	7. 692	7. 468	16. 860	1. 00 38. 80
	atom	2371	0	ALA	306	6. 844	8. 320	17. 132	1. 00 38. 28
	atom	2372	N	LYS	307	8. 608	7. 040	17. 720	1. 00 41. 45
10	atom	2373	CA	LYS	307	8. 740	7. 491	19. 096	1. 00 42. 81
	atom	2374	CB	LYS	307	10. 214	7. 458	19. 503	1. 00 40. 40
	atom	2375	CG	LYS	307	10. 729	6. 087	19. 916	1. 00 37. 86
	atom	2376	CD	LYS	307	10. 575	5. 048	18. 831	1. 00 37. 54
	atom	2377	CE	LYS	307	11. 918	4. 432	18. 481	1. 00 37. 85
15	atom	2378	NZ	LYS	307	12. 924	5. 507	18. 258	1. 00 35. 80
	atom	2379	С	LYS	307	8. 167	8. 865	19. 449	1. 00 49. 60
	atom	2380	0	LYS	307	8. 788	9. 907	19. 188	1. 00 46. 97
	atom	2381	N	LEU	308	6. 982	8. 842	20. 066	1. 00 51. 53
·	atom	2382	CA	LEU	308	6. 279	10. 039	20. 524	1. 00 51. 53
20	atom	2383	CB	LEU	308	4. 758	9. 842	20. 389	1. 00 52. 02
	atom	2384	CG	LEU	308	4. 157	8. 437	20. 605	1. 00 51. 76
	atom	2385	CD1	LEU	308	3. 708	8. 288	22. 068	1. 00 47. 91
	atom	2386	CD2	LEU	308	2. 983	8. 206	19. 643	1. 00 43. 18
	atom	2387	C	LEU	308	6. 663	10. 183	21. 998	1. 00 54. 77
25	atom	2388	0	LEU	308	5. 997	10. 874	22. 786	1. 00 57. 44
	atom	2389	N	GLN	309	7. 766	9. 517	22. 338	1. 00 56. 72
	atom	2390	CA	GLN	309	8. 312	9. 459	23. 693	1. 00 53. 19
	atom	2391	CB	GLN	309	8. 499	8. 002	24. 077	1. 00 52. 08
	atom	2392	CG	GLN	309	9. 172	7. 229	22. 970	1. 00 47. 86
3 0	atom	2393	CD	GLN	309	8. 527	5. 897	22. 742	1. 00 48. 89
	atom	2394	0E1	GLN	309	8. 830	5. 208	21. 775	1. 00 51. 59
	atom	2395	NE2	GLN	309	7. 627	5. 513	23. 642	1. 00 55. 53
	atom	2396	С	GLN	309	9. 645	10. 190	23. 888	1. 00 52. 39
	atom	2397	0	GLN	309	9. 840	11. 303	23. 383	1. 00 53. 77
3 5	atom	2398	N	ASP	310	10. 573	9. 545	24. 599	1. 00 46. 73
	atom	2399	CA	ASP	310	11. 850	10. 182	24. 914	1. 00 46. 17

```
1.00 50.62
                                                     10. 525
                                                               26. 404
                          ASP
                                 310
                                            11. 877
              2400
                     CB
      atom
                                                               27.000
                                                                        1. 00 54. 61
                          ASP
                                            10.471
                                                     10.620
                     CG
                                 310
              2401
      atom
                     OD1 ASP
                                             9.975
                                                       9. 590
                                                               27. 507
                                                                        1. 00 57. 26
              2402
                                 310
      atom
                                                               26. 954
                                                                        1. 00 52. 46
                                             9.857
                                                     11. 716
      atom
              2403
                     OD2 ASP
                                 310
                          ASP
                                            13.081
                                                       9. 382
                                                               24. 538
                                                                        1. 00 43. 56
              2404
                     C
                                 310
 5
      atom
                                                                        1.00 34.86
                          ASP
                                            13.580
                                                       8. 537
                                                               25. 297
              2405
                     0
                                 310
      atom
                          CYS
                                                               23. 342
                                                                        1. 00 41. 82
                                            13.571
                                                       9. 683
              2406
                     N
                                 311
      atom
                                                       9.016
                                                               22. 783
                                                                        1. 00 36. 02
                          CYS
                                 311
                                            14. 726
              2407
                     CA
      atom
                                            14. 703
                                                       9. 126
                                                               21. 269
                                                                         1. 00 35. 10
              2408
                     CB
                          CYS
                                 311
      atom
                          CYS
                                 311
                                            13. 643
                                                       7. 931
                                                               20. 531
                                                                         1. 00 41. 50
              2409
                     SG
10
      atom
                                            16.001
                                                               23. 292
                                                                         1.00 32.40
                          CYS
                                                       9. 612
              2410
                     C
                                 311
      atom
                                                               23.655
                                                                         1.00 32.96
                     0
                          CYS
                                 311
                                            16.050
                                                      10.780
              2411
      atom
                                                               23. 335
                                                                         1. 00 29. 68
                                 312
                                            17.032
                                                       8. 783
              2412
                     N
                          THR
      atom
                                                               23. 757
                                                                         1. 00 24. 81
                                            18. 348
                                                       9. 221
                     CA
                          THR
                                 312
              2413
      atom
                                                                         1.00 23.09
                     CB
                          THR
                                 312
                                            18. 551
                                                       9. 120
                                                               25. 297
      atom
              2414
15
                                                                         1.00 20.96
                                                      10.268
                                                               25. 917
              2415
                     OG1 THR
                                 312
                                            17. 974
      atom
                     CG2 THR
                                 312
                                            20.039
                                                       9. 103
                                                               25. 647
                                                                         1. 00 7. 30
              2416
      atom
                                                                         1.00 19.93
                                            19. 286
                                                       8. 291
                                                               23. 048
              2417
                     C
                          THR
                                 312
      atom
                                                                         1.00 21.00
                                                       7.071
                                                               23. 208
                          THR
                                 312
                                            19. 215
              2418
                     0
      atom
                                            20. 146
                                                       8.863
                                                               22. 225
                                                                         1.00 21.26
                      N
                          MET
                                 313
              2419
20
      atom
                                                               21.502
                                                                         1. 00 19. 10
                                            21. 087
                                                       8.039
      atom
              2420
                      CA
                          MET
                                 313
                                            20. 845
                                                                         1. 00 27. 05
                                                       8. 108
                                                               20.003
              2421
                      CB
                          MET
                                 313
      atom
              2422
                      CG
                          MET
                                 313
                                            20. 425
                                                       9. 437
                                                               19. 460
                                                                         1. 00 32. 49
      atom
                                                                         1.00 41.09
                                            19.755
                                                       9. 147
                                                               17.816
               2423
                      SD
                          MET
                                 313
      atom
                                             18. 946
                                                       7. 570
                                                               18.055
                                                                         1. 00 41. 67
              2424
                      CE
                          MET
                                 313
      atom
25
                                             22. 522
                                                       8.371
                                                               21. 775
                                                                         1. 00 15. 03
               2425
                      C
                          MET
                                  313
      atom
                                                       9. 456
                                                               22. 237
                                                                         1.00 9.15
                                             22. 862
               2426
                          MET
                                  313
      atom
                      0
                                             23. 360
                                                       7. 394
                                                               21. 477
                                                                         1.00 14.59
               2427
                      N
                          LEU
                                  314
      atom
                                  314
                                             24. 786
                                                       7. 512
                                                               21. 649
                                                                         1. 00 13. 18
      atom
               2428
                      CA
                          LEU
                                                                         1.00 16.64
                                                       6.561
                                                               22. 753
               2429
                      CB
                                  314
                                             25. 237
                          LEU
30
      atom
                      CG
                                             26. 661
                                                       6.691
                                                               23. 270
                                                                         1. 00 12. 33
               2430
                          LEU
                                  314
      atom
                                                                         1. 00 17. 77
                                             26. 848
                                                       8. 047
                                                                23. 960
               2431
                      CD1 LEU
                                  314
      atom
                                                       5. 591
                                                                24. 223
                                                                         1. 00 12. 90
                                             26. 894
               2432
                      CD2 LEU
                                  314
      atom
                                             25. 239
                                                       7. 028
                                                                20. 299
                                                                         1. 00 14. 13
               2433
                      C
                           LEU
                                  314
      atom
                                                                         1.00 14.97
                                  314
                                             24.850
                                                       5. 949
                                                                19.880
               2434
                      0
                           LEU
       atom
35
                                                                19.611
                                                                         1.00 14.46
                                             26. 035
                                                       7.834
               2435
                      N
                           VAL
                                  315
       atom
```

	atom	2436	CA	VAL	315	26. 490	7. 507	18. 260	1. 00 8. 47
	atom	2437	CB	VAL	315	25. 917	8. 539	17. 235	1. 00 9. 94
	atom	2438	CG1	VAL	315	26. 126	8. 042	15. 792	1. 00 6. 93
	atom	2439	CG2	VAL	315	24. 448	8. 787	17. 529	1. 00 7. 37
5	atom	2440	С	VAL	315	28. 000	7. 504	18. 113	1. 00 8. 16
	atom	2441	0	VAL	315	28. 666	8. 471	18. 449	1. 00 11. 71
	atom	2442	N	ASN	316	28. 534	6. 416	17. 597	1. 00 13. 18
	atom	2443	CA	ASN	316	29. 976	6. 296	17. 363	1. 00 16. 47
	atom	2444	CB	ASN	316	30. 589	5. 250	18. 304	1. 00 20. 03
10	atom	2445	CG	ASN	316	30. 712	5. 740	19. 732	1. 00 18. 37
	atom	2446	0D1	ASN	316	31. 819	5. 855	20. 260	1. 00 24. 84
	atom	2447	ND2	ASN	316	29. 581	6. 024	20. 364	1. 00 11. 13
	atom	2448	C	ASN	316	30. 130	5. 846	15. 898	1. 00 15. 78
	atom	2449	0	ASN	316	30. 014	4. 652	15. 596	1. 00 12. 76
15	atom	2450	N	GLY	317	30. 383	6. 805	15. 002	1. 00 15. 43
	atom	2451	CA	GLY	317	30. 492	6. 486	13. 587	1. 00 16. 69
	atom	2452	C	GLY	317	29. 186	5. 824	13. 155	1. 00 19. 29
	atom	2453	0	GLY	317	28. 119	6. 441	13. 232	1. 00 13. 28
	atom	2454	N	ASP	318	29. 262	4. 558	12. 736	1. 00 20. 60
2 0	atom	2455	CA	ASP	318	28. 080	3. 798	12. 313	1. 00 22. 17
	atom	2456	CB	ASP	318	28. 486	2. 767	11. 281	1. 00 23. 30
	atom	2457	CG	ASP	318	29. 724	2. 027	11. 684	1. 00 25. 41
	atom	2458	0D1	ASP	318	30. 744	2. 692	11. 980	1. 00 27. 38
	atom	2459	0D2	ASP	318	29. 676	0. 788	11. 710	1. 00 25. 90
2 5	atom	2460	C	ASP	318	27. 403	3. 067	13. 479	1. 00 24. 22
	atom	2461	0	ASP	318	26. 245	2. 626	13. 380	1. 00 20. 11
	atom	2462	N	ASP	319	28. 135			1. 00 25. 94
	atom	2463	CA	ASP	319	27. 559			1. 00 26. 01
	atom	2464	CB	ASP	319	28. 654		16. 680	1. 00 26. 27
3 0	atom	2465	CG	ASP	319	28. 826		16. 677	1. 00 29. 65
	atom	2466		ASP	319	29. 973		16. 521	1. 00 35. 30
	atom	2467	0D2	ASP	319	27. 813	-0. 439	16. 828	1. 00 30. 47
	atom	2468	C		319	26. 552		16. 452	1. 00 20. 07
	atom	2469	0	ASP	319	26. 826	4. 269	16. 766	1. 00 15. 33
3 5	atom	2470	N	LEU	320	25. 376		16. 697	1. 00 16. 66
	atom	2471	CA	LEU	320	24. 341	3. 341	17. 350	1. 00 17. 93

	atom	2472	СВ	LEU	320	23. 428	3. 994	16. 294	1. 00 14. 80
	atom	2473	CG	LEU	320	22. 126	4. 657	16. 786	1. 00 12. 07
	atom	2474	CD1	LEU	320	22. 214	6. 175	16. 732	1. 00 12. 14
	atom	2475	CD2	LEU	320	20. 993	4. 180	15. 980	1. 00 14. 40
5	atom	2476	С	LEU	320	23. 484	2. 538	18. 314	1. 00 18. 43
	atom	2477	0	LEU	320	23. 097	1. 410	18. 042	1. 00 23. 21
	atom	2478	N	VAL	321	23. 211	3. 135	19. 460	1. 00 18. 50
	atom	2479	CA	VAL	321	22. 327	2. 539	20. 441	1. 00 21. 88
	atom	2480	CB	VAL	321	23. 097	1. 966	21. 662	1. 00 20. 42
10	atom	2481	CG1	VAL	321	24. 196	2. 895	22. 062	1. 00 17. 51
	atom	2482	CG2	VAL	321	22. 136	1. 735	22. 817	1. 00 22. 27
	atom	2483	C	VAL	321	21. 413	3. 683	20. 878	1. 00 20. 73
	atom	2484	0	VAL	321	21. 826	4. 844	20. 897	1. 00 21. 92
	atom	2485	N	VAL	322	20. 162	3. 371	21. 181	1. 00 22. 82
15	atom	2486	CA	VAL	322	19. 230	4. 400	21. 623	1. 00 20. 84
	atom	2487	CB	VAL	322	18. 343	4. 957	20. 448	1. 00 18. 24
	atom	2488	CG1	VAL	322	18. 628	4. 215	19. 149	1. 00 22. 10
	atom	2489	CG2	VAL	322	16. 880	4. 885	20. 810	1. 00 6. 40
	atom	2490	C	VAL	322	18. 353	3. 819	22. 714	1. 00 23. 90
20	atom	2491	0	VAL	322	17. 873	2. 685	22. 608	1. 00 22. 28
	atom	2492	N	ILE	323	18. 176	4. 585	23. 786	1. 00 24. 77
	atom	2493	CA	ILE	323	17. 349	4. 134	24. 893	1. 00 25. 24
	atom	2494	CB	ILE	323	18. 158	4. 137	26. 190	1. 00 22. 50
	atom	2495	CG2		323	17. 259	3. 829	27. 384	1. 00 23. 14
25	atom	2496		ILE	323	19. 261	3. 095	26. 066	1. 00 16. 23
	atom	2497	CD1	ILE	323	20. 397	3. 297	27. 008	1. 00 15. 90
	atom	2498	С	ILE	323	16. 131			1. 00 25. 29
	atom	2499	0	ILE	323	16. 254			1. 00 25. 71
	atom	2500	N	CYS	324	14. 955	4. 434	25. 021	1. 00 23. 65
3 0	atom	2501	CA	CYS	324	13. 719	5. 201	25. 074	1. 00 28. 54
	atom	2502	СВ	CYS	324	13. 120	5. 298	23. 668	1. 00 22. 91
	atom	2503	SG	CYS	324	12. 651	3. 689	23. 036	1. 00 24. 99
	atom	2504	С	CYS	324	12. 698	4. 560	26. 004	1. 00 32. 49
	atom	2505	0	CYS	324	12. 954	3. 502	26. 611	1. 00 36. 12
3 5	atom	2506	N	GLU	325	11. 541		26. 117	1. 00 34. 49
	atom	2507	CA	GLU	325	10. 454	4. 697	26. 942	1. 00 34. 97

	atom	2508	СВ	GLU	325	9. 367	5. 759	27. 101	1. 00 33. 51
	atom	2509	CG	GLU	325	9. 577	6. 705	28. 273	1. 00 39. 83
	atom	2510	CD	GLU	325	10. 005	6. 005	29. 565	1. 00 40. 86
	atom	2511		GLU	325	9. 637	4. 828	29. 786	1. 00 41. 53
5	atom	2512		GLU	325	10. 716	6. 644	30. 367	1. 00 41. 72
	atom	2513	С	GLU	325	9. 863	3. 470	26. 243	1. 00 33. 00
	atom	2514	0	GLU	325	10. 045	3. 291	25. 038	1. 00 33. 16
	atom	2515	N	SER	326	9. 177	2. 608	26. 981	1. 00 29. 74
	atom	2516	CA	SER	326	8. 566	1. 462	26. 332	1. 00 27. 88
10	atom	2517	CB	SER	326	8. 895	0. 154	27. 045	1. 00 29. 60
	atom	2518	0G	SER	326	8. 592	-0. 968	26. 221	1. 00 27. 55
	atom	2519	С	SER	326	7. 082	1. 687	26. 359	1. 00 29. 75
	atom	2520	0	SER	326	6. 580	2. 500	27. 130	1. 00 26. 24
	atom	2521	N	ALA	327	6. 382	0. 983	25. 483	1. 00 33. 65
15	atom	2522	CA	ALA	327	4. 937	1. 093	25. 404	1. 00 32. 64
	atom	2523	CB	ALA	327	4. 533	1. 949	24. 224	1. 00 35. 74
	atom	2524	C	ALA	327	4. 455	-0. 314	25. 212	1. 00 35. 26
	atom	2525	0	ALA	327	3. 405	-0. 541	24. 613	1. 00 36. 42
	atom	2526	N	GLY	328	5. 250	-1. 259	25. 715	1. 00 35. 74
20	atom	2527	CA	GLY	328	4. 906	-2. 658	25. 604	1. 00 35. 12
	atom	2528	С	GLY	328	5. 739	-3. 370	24. 563	1. 00 37. 03
	atom	2529	0	GLY	328	6. 267	-2. 751	23. 648	1. 00 39. 73
	atom	2530	N	THR	329	5. 828	-4. 686	24. 705	1. 00 35. 68
	atom	2531	CA	THR	329		-5. 553	23. 816	1. 00 35. 67
25	atom	2532	CB	THR	329	6. 517	-6. 994	24. 334	1. 00 31. 01
	atom	2533	0G1		329		-7. 020		1. 00 30. 45
	atom	2534		THR	329	7. 348	-7. 935	23. 486	1. 00 35. 07
	atom	2535	С	THR	329	6. 188	-5. 555	22. 338	1. 00 41. 30
	atom	2536	0	THR	329	6. 985	-5. 217	21. 459	1. 00 42. 33
3 0	atom	2537	N	GLN	330	4. 954	-5. 964	22. 068	1. 00 45. 00
	atom	2538	CA	GLN	330	4. 464	-6. 047	20. 705	1. 00 45. 98
	atom	2539	CB	GLN	330	3. 072	-6. 675	20. 703	1. 00 50. 57
	atom	2540	CG	GLN	330	2. 859	-7. 708	19. 613	1. 00 53. 88
	atom	2541	CD	GLN	330	1. 764	-8. 697	19. 954	1. 00 55. 97
3 5	atom	2542	0E1		330	2. 015	-9. 713	20. 598	1. 00 58. 15
	atom	2543	NE2	GLN	330	0. 541	-8. 404	19. 524	1. 00 58. 64

```
20.017
                                                                        1. 00 46. 57
                                                     -4.690
                     C
                          GLN
                                 330
                                             4. 417
              2544
      atom
                                                     -4.588
                                                               18.809
                                                                        1. 00 45. 26
                                             4. 625
                          GLN
                                 330
      atom
              2545
                     0
                                                     -3.648
                                                               20. 785
                                                                        1.00 42.44
                                             4. 138
              2546
                     N
                          GLU
                                 331
      atom
                                                               20. 216
                                                                        1. 00 42. 19
              2547
                     CA
                          GLU
                                 331
                                             4. 054
                                                     -2. 318
      atom
                          GLU
                                                     -1.414
                                                               21. 193
                                                                        1. 00 45. 19
                                             3. 307
                     CB
                                 331
              2548
 5
      atom
                                                     -2.173
                                                               22. 420
                                                                        1.00 53.99
              2549
                          GLU
                                             2. 738
                     CG
                                 331
      atom
                                                     -3.035
                                                               22. 106
                                                                        1.00 61.39
                          GLU
                                 331
                                             1. 499
              2550
                     CD
      atom
                                                                        1. 00 62. 11
                                                     -4.022
                                                               21. 340
                     OE1 GLU
                                             1. 620
              2551
                                 331
      atom
                                                                         1.00 60.82
                                                               22. 631
                     OE2 GLU
                                 331
                                             0. 401
                                                     -2. 733
              2552
      atom
                                                      -1.807
                                                               19. 926
                                                                         1. 00 42. 42
                     C
                          GLU
                                 331
                                             5. 468
              2553
      atom
10
                                                     -1.304
                                                               18.838
                                                                        1. 00 41. 63
                                             5. 746
                          GLU
                                 331
      atom
              2554
                     0
                                             6.361
                                                      -1.970
                                                               20.899
                                                                         1. 00 40. 40
                          ASP
                                 332
              2555
                     N
      atom
                                                      -1. 554
                                                               20. 779
                                                                         1. 00 39. 72
                          ASP
                                 332
                                             7. 759
              2556
                     CA
      atom
                                                               22. 066
                                                                         1.00 43.46
                                             8. 522
                                                      -1.903
                          ASP
                                 332
      atom
              2557
                     CB
                                             8. 576
                                                      -0.750
                                                               23. 070
                                                                         1. 00 44. 40
              2558
                     CG
                          ASP
                                 332
      atom
15
                                             9. 624
                                                      -0. 613
                                                               23. 737
                                                                         1. 00 50. 21
              2559
                     OD1 ASP
                                 332
      atom
                                                       0.005
                                                               23. 214
                                                                         1. 00 42. 70
                                 332
                                              7. 587
                     OD2 ASP
              2560
      atom
                                                               19.587
                                                                         1. 00 38. 03
                          ASP
                                 332
                                              8. 455
                                                      -2.238
              2561
                     C
      atom
                                                                         1. 00 35. 13
                                                      -1.669
                                                               18. 973
                                  332
                                              9. 360
              2562
                     0
                          ASP
      atom
                                                               19. 274
                                                                         1.00 35.59
                                              8. 036
                                                      -3.463
                          ALA
                                  333
      atom
              2563
                     N
20
                                                                         1. 00 34. 66
              2564
                     CA
                          ALA
                                  333
                                              8.606
                                                      -4. 223
                                                               18. 157
      atom
                                                                         1. 00 28. 59
                                  333
                                              8.080
                                                      -5. 660
                                                               18. 188
               2565
                     CB
                          ALA
      atom
                                  333
                                              8. 250
                                                      -3.559
                                                                16.818
                                                                         1. 00 35. 39
                          ALA
               2566
                     C
      atom
                                                                15.918
                                                                         1. 00 32. 47
                                              9.096
                                                      -3.397
               2567
                     0
                          ALA
                                  333
      atom
                                                                         1.00 32.90
                                              6.980
                                                      -3.194
                                                                16. 701
                                  334
               2568
                          ALA
25
      atom
                      N
                                                                         1. 00 35. 01
                                  334
                                              6. 475
                                                      -2.528
                                                                15. 522
                      CA
                          ALA
               2569
      atom
                                                                15. 614
                                                                         1. 00 30. 49
                                              4. 958
                                                      -2.387
      atom
               2570
                      CB
                          ALA
                                  334
                                                                         1. 00 36. 42
                                  334
                                              7. 132
                                                      -1. 151
                                                                15. 441
               2571
                      C
                           ALA
      atom
                                                      -0.580
                                              7. 257
                                                                14. 360
                                                                         1. 00 38. 09
                      0
                           ALA
                                  334
               2572
      atom
                                                                         1.00 35.49
                                                      -0.622
                                                                16. 588
                                  335
                                              7. 554
               2573
                      N
                           SER
30
      atom
                                                       0.685
                                                                16.624
                                                                         1.00 33.47
                                              8. 197
                           SER
                                  335
               2574
                      CA
      atom
                                                                18.066
                                                                         1. 00 35. 80
                           SER
                                  335
                                              8.376
                                                       1. 156
               2575
                      CB
      atom
                                                       1. 715
                                                                18. 558
                                                                         1. 00 44. 77
                                              7. 166
      atom
               2576
                      0G
                           SER
                                  335
                                                                         1. 00 33. 00
                                  335
                                              9. 549
                                                        0.611
                                                                15. 937
               2577
                      C
                           SER
      atom
                                                        1.509
                                                                15. 186
                                                                         1.00 31.79
                           SER
                                  335
                                              9. 923
               2578
                      0
      atom
35
                                                      -0.468
                                                                16. 193
                                                                         1. 00 30. 58
                                             10. 278
               2579
                      N
                           LEU
                                  336
       atom
```

	atom	2580	CA	LEU	336	11. 580	-0. 643	15. 580	1. 00	32. 25
	atom	2581	CB	LEU	336	12. 355	-1. 740	16. 300	1. 00	33. 78
	atom	2582	CG	LEU	336	13. 103	-1. 268	17. 549	1. 00	32. 01
	atom	2583	CD1	LEU	336	12. 219	-0. 378	18. 402	1. 00	19. 15
5	atom	2584	CD2	LEU	336	13. 556	-2. 491	18. 319	1. 00	32. 33
	atom	2585	C	LEU	336	11. 397	-0. 989	14. 111	1. 00	33. 05
	atom	2586	0	LEU	336	12. 301	-0. 798	13. 298	1. 00	32. 54
•	atom	2587	N	ARG	337	10. 212	-1. 500	13. 785	1. 00	34. 57
	atom	2588	CA	ARG	337	9. 861	-1. 840	12. 415	1. 00	33. 94
10	atom	2589	CB	ARG	337	8. 481	-2. 502	12. 376	1. 00	40. 01
	atom	2590	CG	ARG	337	8. 468	-3. 887	11. 748	1. 00	50. 31
	atom	2591	CD	ARG	337	7. 152	-4. 156	11. 006	1. 00	60. 06
	atom	2592	NE	ARG	337	7. 349	-4. 414	9. 573	1. 00	64. 64
	atom	2593	CZ	ARG	337	6. 370	-4. 443	8. 666	1. 00	66. 06
15	atom	2594	NH1	ARG	337	5. 108	-4. 228	9. 027		65. 93
	atom	2595	NH2	ARG	337	6. 653	-4. 693	7. 392		63. 83
	atom	2596	C	ARG	337	9. 833	-0. 524	11. 628		31. 50
	atom	2597	0	ARG	337	10. 527	-0. 367	10. 614		30. 22
	atom	2598	N	VAL	338	9. 034	0. 426	12. 104		25. 96
20	atom	2599	CA	VAL	338	8. 942	1. 725	11. 446		23. 74
	atom	2600	CB	VAL	338	8. 008	2. 682	12. 212		20. 53
	atom	2601	CG1	VAL	338	7. 954	4. 005	11. 504		16. 58
	atom	2602	CG2	VAL	338	6. 586	2. 080	12. 323		23. 01
	atom	2603	С	VAL	338	10. 321	2. 375	11. 393		25. 39
2 5	atom	2604	0	VAL	338	10. 760	2. 853	10. 348		25. 50
	atom	2605	N	PHE	339	11. 008	2. 372	12. 534		24. 65
	atom	2606	CA	PHE	339	12. 323	2. 985	12. 643		19. 60
	atom	2607	СВ	PHE	339	12. 934	2. 698	14. 018		15. 60
	atom	2608	CG	PHE	339	14. 325	3. 191	14. 164	1. 00	3. 47
3 0	atom	2609		PHE	339	14. 569	4. 487	14. 582	1. 00	9. 45
	atom	2610		PHE	339	15. 390	2. 374	13. 849	1. 00	4. 97
	atom	2611		PHE	339	15. 859	4. 965	14. 685	1. 00	5. 74
	atom	2612		PHE	339	16. 685	2. 830	13. 941	1. 00	3. 08
	atom	2613	CZ	PHE	339	16. 927	4. 126	14. 360	1. 00	5. 97
3 5	atom	2614	C	PHE	339	13. 232	2. 480	11. 534		18. 70
	atom	2615	0	PHE	339	13. 866	3. 267	10. 845	1. 00	12. 55

	atom	2616	N	THR	340	13. 282	1. 164	11. 381	1. 00 20. 16
	atom	2617	CA	THR	340	14. 077	0. 510	10. 341	1. 00 23. 32
	atom	2618	CB	THR	340	13. 934	-1. 028	10. 463	1. 00 23. 80
	atom	2619	0G1	THR	340	14. 663	-1. 472	11. 616	1. 00 26. 76
5	atom	2620	CG2	THR	340	14. 441	-1. 740	9. 182	1. 00 14. 19
	atom	2621	С	THR	340	13. 618	0. 947	8. 925	1. 00 21. 79
	atom	2622	0	THR	340	14. 432	1. 172	8. 031	1. 00 21. 76
	atom	2623	N	GLU	341	12. 308	1. 053	8. 731	1. 00 18. 62
	atom	2624	CA	GLU	341	11. 766	1. 482	7. 446	1. 00 20. 97
10	atom	2625	CB	GLU	341	10. 242	1. 518	7. 477	1. 00 18. 92
	atom	2626	CG	GLU	341	9. 568	0. 369	6. 799	1. 00 27. 50
	atom	2627	CD	GLU	341	8. 219	0. 080	7. 416	1. 00 3236
	atom	2628	0E1	GLU	341	8. 195	-0. 569	8. 481	1. 00 33. 70
	atom	2629	0E2	GLU	341	7. 187	0. 507	6. 846	1. 00 36. 79
15	atom	2630	C	GLU	341	12. 259	2. 878	7. 081	1. 00 18. 52
	atom	2631	0	GLU	341	12. 616	3. 117	5. 943	1. 00 16. 55
	atom	2632	N	ALA	342	12. 248	3. 801	8. 042	1. 00 15. 66
	atom	2633	CA	ALA	342	12. 703	5. 147	7. 760	1. 00 11. 85
	atom	2634	CB	ALA	342	12. 420	6. 075	8. 949	1.00 5.98
2 0	atom	2635	C	ALA	342	14. 192	5. 089	7. 451	1. 00 13. 06
	atom	2636	0	ALA	342	14. 630	5. 655	6. 466	1. 00 17. 39
	atom	2637	N	MET	343	14. 958	4. 378	8. 279	1. 00 14. 83
	atom	2638	CA	MET	343	16. 401	4. 240	8. 096	1. 00 15. 43
	atom	2639	CB	MET	343	17. 005	3. 288	9. 152	1. 00 17. 16
2 5	atom	2640	CG	MET	343	17. 219	3. 903	10. 544	1. 00 14. 16
	atom	2641	SD	MET	343	18. 366	5. 309	10. 607	
	atom	2642	CE	MET	343	19. 905	4. 462	10. 694	1. 00 8. 77
	atom	2643	С	MET	343	16. 729	3. 717	6. 686	1. 00 20. 04
	atom	2644	0	MET	343	17. 685	4. 188	6. 066	1. 00 22. 60
3 0	atom	2645	N	THR	344	15. 952	2. 748	6. 196	1. 00 15. 69
	atom	2646	CA	THR	344	16. 158	2. 191	4. 859	1. 00 17. 93
	atom	2647	CB	THR	344	15. 265	0. 945	4. 622	1. 00 19. 23
	atom	2648	0G1	THR	344	15. 461	0. 013	5. 680	1. 00 16. 90
	atom	2649		THR	344	15. 626	0. 265	3. 313	1. 00 23. 01
3 5	atom	2650	С	THR	344	15. 841	3. 233	3. 767	1. 00 16. 50
	atom	2651	0	THR	344	16. 473	3. 258	2. 708	1. 00 14. 88

	atom	2652	N	ARG	345	14. 857	4. 086	4. 028	1. 00 12. 81
	atom	2653	CA	ARG	345	14. 483	5. 130	3. 075	1. 00 12. 96
	atom	2654	CB	ARG	345	13. 256	5. 890	3. 558	1. 00 12. 13
	atom	2655	CG	ARG	345	12. 127	5. 933	2. 572	1. 00 24. 12
5	atom	2656	CD	ARG	345	10. 831	5. 426	3. 174	1. 00 19. 46
	atom	2657	NE	ARG	345	10. 495	6. 121	4. 416	1. 00 22. 42
	atom	2658	CZ	ARG	345	9. 921	5. 523	5. 455	1. 00 23. 15
	atom	2659	NH1	ARG	345	9. 615	4. 230	5. 387	1. 00 22. 49
	atom	2660	NH2	ARG	345	9. 642	6. 211	6. 553	1. 00 22. 68
10	atom	2661	C	ARG	345	15. 628	6. 110	2. 972	1. 00 11. 64
	atom	2662	0	ARG	345	15. 861	6. 699	1. 939	1. 00 15. 57
	atom	2663	N	TYR	346	16. 344	6. 285	4. 073	1. 00 16. 09
	atom	2664	CA	TYR	346	17. 452	7. 219	4. 117	1. 00 10. 12
	atom	2665	CB	TYR	346	17. 673	7. 718	5. 537	1. 00 10. 24
15	atom	2666	CG	TYR	346	16. 491	8. 434	6. 161	1. 00 8. 55
	atom	2667	CD1	TYR	346	16. 356	8. 477	7. 546	1. 00 2. 00
	atom	2668	CE1	TYR	346	15. 341	9. 215	8. 159	1. 00 7. 85
	atom	2669	CD2	TYR	346	15. 566	9. 149	5. 378	1. 00 3. 32
	atom	2670	CE2	TYR	346	14. 532	9. 900	5. 980	1. 00 4. 00
20	atom	2671	CZ	TYR	346	14. 434	9. 921	7. 377	1. 00 11. 88
	atom	2672	0H	TYR	346	13. 415	10. 589	8. 011	1. 00 16. 58
	atom	2673	C	TYR	346	18. 688	6. 530	3. 649	1. 00 10. 73
	atom	2674	0	TYR	346	19. 759	7. 131	3. 648	1. 00 14. 56
	atom	2675	N	SER	347	18. 544	5. 262	3. 263	1. 00 8. 88
25	atom	2676	CA	SER	347	19. 682	4. 485	2. 779	1. 00 11. 02
	atom	2677	CB	SER	347	20. 436	5. 257	1. 719	1. 00 7. 10
	atom	2678	0G	SER	347	21. 677	4. 649	1. 524	1. 00 15. 91
	atom	2679	C	SER	347	20. 655	4. 127	3. 891	1. 00 17. 57
	atom	2680	0	SER	347	21. 824	4. 535	3. 894	1. 00 16. 67
3 0	atom	2681	N	ALA	348	20. 139	3. 374	4. 850	1. 00 21. 53
	atom	2682	CA	ALA	348	20. 901	2. 902	5. 984	1. 00 16. 82
	atom	2683	CB	ALA	348	20. 931	3. 942	7. 063	1. 00 19. 61
	atom	2684	C	ALA	348	20. 129	1. 676	6. 436	1. 00 17. 95
	atom	2685	0	ALA	348	19. 612	1. 636	7. 541	1. 00 19. 35
3 5	atom	2686	N	PR0	349	20. 019	0. 666	5. 558	1. 00 17. 48
	atom	2687	CD	PR0	349	20. 619	0. 634	4. 218	1. 00 17. 13

```
5. 845
                                                                               1. 00 22. 29
                                                19. 309
                                                          -0.585
               2688
                       CA
                            PR0
                                    349
      atom
                                                          -1.270
                                                                      4. 485
                                                                               1. 00 18. 68
                            PR<sub>0</sub>
                                    349
                                                19. 249
               2689
                       CB
      atom
                                                20. 508
                                                          -0.822
                                                                      3.840
                                                                               1. 00 18. 33
                            PR0
                                    349
               2690
                       CG
      atom
                                                                               1. 00 22. 65
                                                          -1.390
                                                                      6.883
               2691
                       C
                            PR0
                                    349
                                                20. 107
      atom
                                                21. 327
                                                          -1.266
                                                                      6. 976
                                                                               1. 00 22. 99
                            PR<sub>0</sub>
                                    349
               2692
                       0
 5
      atom
                                                                               1.00 25.69
                                                19. 433
                                                          -2.257
                                                                      7.640
                       N
                            PR<sub>0</sub>
                                    350
               2693
      atom
                                                                               1.00 28.35
                                                17.999
                                                          -2.613
                                                                      7. 620
               2694
                            PR0
                                    350
      atom
                       CD
                                                                      8. 656
                                                                               1. 00 29. 11
                                                20. 147
                                                          -3.026
                            PR<sub>0</sub>
                                    350
      atom
               2695
                       CA
                                                          -3.186
                                                                      9. 747
                                                                               1. 00 23. 51
                2696
                       CB
                            PR<sub>0</sub>
                                    350
                                                19. 093
      atom
                                                17. 818
                                                          -3.395
                                                                      8. 940
                                                                               1. 00 21. 77
                2697
                       CG
                            PR<sub>0</sub>
                                    350
      atom
10
                                                                               1.00 33.76
                                                20. 721
                                                          -4.376
                                                                      8. 241
                             PR0
                                    350
                2698
                       C
      atom
                                                                      7. 431
                                                                               1.00 35.09
                                    350
                                                20. 133
                                                          -5.090
                2699
                             PR<sub>0</sub>
                       0
      atom
                                                                      8.815
                                                                               1. 00 38. 72
                                                21. 874
                                                          -4. 718
                2700
                             GLY
                                    351
      atom
                                                                               1. 00 42. 12
                                                22. 476
                                                                      8. 549
                            GLY
                                    351
                                                          -6.010
                2701
       atom
                       CA
                                                                               1. 00 45. 61
                             GLY
                                                21. 610
                                                          -7. 000
                                                                      9. 315
                2702
                       C
                                    351
       atom
15
                                                                               1. 00 47. 44
                                                21. 067
                                                                      8. 743
                             GLY
                                    351
                                                          -7. 954
       atom
                2703
                       0
                                                21. 483
                                                          -6.752
                                                                     10.621
                                                                               1. 00 44. 23
                             ASP
                                    352
                2704
                       N
       atom
                                                          -7.564
                                                                     11. 519
                                                                               1.00 41.08
                2705
                       CA
                            ASP
                                    352
                                                20.660
       atom
                                                                     12.764
                                                                               1. 00 43. 20
                                                          -7.984
                       CB
                             ASP
                                    352
                                                21. 451
       atom
                2706
                                                          -8.844
                                                                     12. 434
                                                                               1. 00 47. 05
                       CG
                             ASP
                                    352
                                                22. 665
                2707
       atom
20
                                                                               1. 00 49. 57
                                                                     12. 015
                2708
                       OD1 ASP
                                    352
                                                22. 475 -10. 011
       atom
                                                                               1. 00 43. 57
                                                23. 809
                                                          -8.358
                                                                     12. 599
                2709
                       OD2 ASP
                                     352
       atom
                                                                               1.00 35.01
                       C
                             ASP
                                     352
                                                19. 544
                                                          -6.618
                                                                     11. 929
                2710
       atom
                                                                               1. 00 36. 47
                                                           -5.445
                                                                     12. 194
                                     352
                                                19. 787
       atom
                2711
                       0
                             ASP
                                                                     11.969
                                                                               1. 00 31. 96
                                     353
                                                18. 304
                                                          -7.100
                2712
                       N
                             PR<sub>0</sub>
25
       atom
                                                                     11.653
                                                                               1. 00 33. 23
                       CD
                             PR0
                                     353
                                                17. 786
                                                           -8.437
                2713
       atom
                                                                                1. 00 32. 72
                                                           -6. 177
                                                                     12. 363
                             PR<sub>0</sub>
                                     353
                                                17. 238
       atom
                2714
                        CA
                                                           -7.010
                                                                     12. 218
                                                                               1. 00 30. 87
                2715
                        CB
                             PR<sub>0</sub>
                                     353
                                                15. 961
       atom
                                     353
                                                16. 352
                                                           -8. 150
                                                                     11. 317
                                                                                1. 00 33. 49
                2716
                        CG
                             PR<sub>0</sub>
       a tom
                                                                                1.00 29.30
                                                                     13. 778
                                     353
                                                17. 426
                                                           -5. 659
                2717
                        C
                             PR<sub>0</sub>
       atom
30
                                     353
                                                18. 168
                                                           -6.231
                                                                     14. 563
                                                                                1.00 31.98
                2718
                        0
                             PR0
       atom
                                                           -4.526
                                                                     14. 103
                                                                                1. 00 26. 36
                2719
                        N
                             PR<sub>0</sub>
                                     354
                                                16. 808
       atom
                                                                     13. 280
                                                                                1. 00 25. 22
                                                           -3.614
                             PR<sub>0</sub>
                                     354
                                                15. 998
       atom
                2720
                        CD
                                                           -4. 037
                                                                     15. 472
                                                                                1. 00 25. 21
                2721
                        CA
                             PR<sub>0</sub>
                                     354
                                                 16. 977
       atom
                                                                                1. 00 23. 85
                                     354
                                                 16. 557
                                                           -2.581
                                                                     15. 380
                2722
                        CB
                             PR<sub>0</sub>
       atom
35
                                                                                1. 00 23. 54
                                                           -2. 571
                                                                     14. 271
                        CG
                                     354
                                                 15. 528
       atom
                2723
                             PR0
```

```
16. 383
                                                                          1. 00 27. 24
                                             16.042
                                                      -4.838
                          PR0
                                  354
              2724 C
      atom
                                                                16. 034
                                                                          1.00 22.85
                                             14. 889
                                                      -5. 090
                          PR<sub>0</sub>
                                  354
              2725
                     0
      atom
                                                                          1. 00 29. 74
                                             16. 532
                                                      -5.260
                                                                17. 540
                          GLN
                                  355
              2726
                     N
      atom
                                                                          1. 00 32. 54
                                                      -6.012
                                                                18. 452
              2727
                     CA
                          GLN
                                  355
                                             15. 672
      atom
                                                                          1. 00 33. 31
                                             16. 264
                                                      -7. 391
                                                                18. 752
                     CB
                          GLN
                                  355
              2728
      atom
 5
                                                                19. 199
                                                                          1.00 42.98
                                  355
                                             15. 215
                                                      -8.408
              2729
                          GLN
                     CG
      atom
                                                                19. 102
                                                                          1. 00 47. 82
                                             15. 701
                                                      -9.856
              2730
                     CD
                          GLN
                                  355
      atom
                                                                          1.00 47.88
                                             14. 915 -10. 774
                                                                18. 818
                     OE1 GLN
                                  355
      atom
              2731
                                                                          1. 00 47. 91
                                             17. 000 -10. 066
                                                                19. 337
              2732
                     NE2 GLN
                                  355
      atom
                                                                          1. 00 29. 39
                                  355
                                             15. 504
                                                      -5. 227
                                                                19: 744
              2733
                     C
                           GLN
      atom
10
                                                      -4. 764
                                                                20. 316
                                                                          1. 00 28. 43
                                             16.490
                          GLN
                                  355
              2734
                     0
      atom
                                                                20. 217
                                                                          1.00 28.59
                           PR<sub>0</sub>
                                  356
                                             14. 255
                                                      -5.056
              2735
                      N
      atom
                                                                          1.00 28.05
                                                                19.690
                                  356
                                             12.960
                                                      -5. 521
               2736
                      CD
                           PR<sub>0</sub>
      atom
                                                                21. 463
                                                                          1.00 29.05
                                  356
                                             14. 118
                                                      -4.298
               2737
                      CA
                           PR0
      atom
                                                                          1. 00 23. 89
                                  356
                                             12. 621
                                                      -4.007
                                                                21. 568
               2738
                      CB
                           PR0
      atom
15
                                                                          1. 00 27. 97
                                                       -4.958
                                                                20. 661
                      CG
                           PR<sub>0</sub>
                                  356
                                             11. 954
               2739
      atom
                                  356
                                             14.659
                                                      -5.097
                                                                22.649
                                                                          1. 00 33. 81
                      C
                           PR<sub>0</sub>
               2740
      atom
                                                                22.776
                                                                          1.00 33.07
                                                       -6.307
               2741
                      0
                           PR<sub>0</sub>
                                  356
                                             14. 409
      atom
                                                                          1.00 32.99
                                                       -4.404
                                                                23. 487
                                  357
                                             15. 426
                           GLU
      atom
               2742
                      N
                                                                          1.00 34.32
                                             16. 037
                                                       -4.979
                                                                24. 667
                      CA
                           GLU
                                  357
               2743
20
      atom
                                                                 24.656
                                                                          1. 00 34. 64
                                             17. 539
                                                       -4. 694
               2744
                      CB
                           GLU
                                  357
      atom
                                             18. 438
                                                                 24.654
                                                                          1. 00 41. 61
                                                       -5. 917
               2745
                      CG
                           GLU
                                  357
      atom
                                                                 24. 028
                                                                          1. 00 46. 37
               2746
                      CD
                           GLU
                                  357
                                             17. 794
                                                       -7.141
      atom
                                                                 23. 347
                                                                          1. 00 49. 58
                                  357
                                             16.749
                                                       -7.006
                      OE1 GLU
      atom
               2747
                                                       -8.247
                                                                 24. 215
                                                                          1. 00 47. 15
                      OE2 GLU
                                  357
                                             18. 342
               2748
25
      atom
                                                                 25. 916
                                                                          1.00 36.99
                                                       -4.379
               2749
                      C
                           GLU
                                  357
                                             15. 413
      atom
                                                                          1.00 40.64
                                                                 25. 908
                                   357
                                             14. 964
                                                       -3.227
                           GLU
      atom
               2750
                      0
                                   358
                                                       -5. 161
                                                                 26. 990
                                                                          1.00 37.60
               2751
                      N
                           TYR
                                              15. 401
      atom
                                                                          1. 00 35. 53
                                   358
                                              14.841
                                                       -4.724
                                                                 28. 257
               2752
                      CA
                           TYR
       atom
                                                                 28. 480
                                                                          1. 00 32. 72
                                                       -5.463
                           TYR
                                   358
                                              13. 519
               2753
                      CB
       atom
30
                                                                          1.00 31.24
                                   358
                                                       -5.183
                                                                 27. 373
                      CG
                           TYR
                                              12. 515
               2754
       atom
                                                                 26. 278
                                                                          1. 00 29. 89
                                              12. 387
                                                       -6.055
               2755
                      CD1 TYR
                                   358
       atom
                                                                 25. 234
                                                                           1. 00 30. 39
                                                       -5. 776
                                              11. 507
                      CE1 TYR
                                   358
       atom
               2756
                                              11. 724
                                                       -4.023
                                                                 27. 393
                                                                           1. 00 21. 47
               2757
                      CD2 TYR
                                   358
       atom
                                                                 26. 364
                                              10.844
                                                       -3.736
                                                                           1. 00 21. 96
               2758
                      CE2 TYR
                                   358
35
       atom
                                                                           1.00 27.72
                                                                 25. 279
                                              10. 740
                                                       -4.616
               2759
                           TYR
                                   358
                      CZ
       atom
```

```
-4.319
                                                               24. 229
                                                                        1. 00 21. 73
                                             9. 900
                          TYR
                                 358
              2760
                     OH
      atom
                                            15. 862
                                                     -5.014
                                                               29. 369
                                                                        1. 00 37. 22
                          TYR
                                 358
              2761
                     C
      atom
                                                                        1.00 35.67
                                                               30. 541
                          TYR
                                 358
                                            15.656
                                                     -4.689
              2762
                     0
      atom
                                                     -5. 620
                                                                        1. 00 36. 82
                                                               28. 962
                                            16. 974
      atom
              2763
                     N
                          ASP
                                 359
                                                               29. 851
                                                                        1. 00 39. 59
                          ASP
                                 359
                                            18. 074
                                                     -5. 977
              2764
                     CA
 5
      atom
                                                     -7. 487
                                                               29. 776
                                                                        1. 00 45. 28
                          ASP
                                 359
                                            18. 331
              2765
                     CB
      atom
                                                                        1.00 48.29
                                                     -8.120
                                                               31. 136
                          ASP
                                 359
                                            18. 558
              2766
                     CG
      atom
                                                               32. 103
                                                                        1.00 55.92
                                            18.876
                                                     -7.395
                     OD1 ASP
                                 359
              2767
      atom
                                                                        1. 00 49. 53
              2768
                     OD2 ASP
                                 359
                                            18. 426
                                                     -9.355
                                                               31. 239
      atom
                                                                        1. 00 38. 72
                                                               29. 385
                                 359
                                            19. 324
                                                     -5. 228
      atom
              2769
                     C
                          ASP
10
                                            20. 122
                                                     -5. 763
                                                               28. 607
                                                                        1. 00 39. 87
                          ASP
                                 359
              2770
                     0
      atom
                                                                         1. 00 36. 52
                                            19. 476
                                                     -3.994
                                                               29.857
              2771
                     N
                          LEU
                                 360
      atom
                                                                         1.00 36.77
                                                               29. 505
                                            20. 603
                                                      -3.129
                          LEU
                                 360
              2772
                     CA
      atom
                                                      -2.161
                                                               30. 651
                                                                         1. 00 34. 29
                                 360
                                            20. 901
              2773
                     CB
                          LEU
      atom
                                                                         1.00 37.55
                                                      -1.272
                                                               30. 465
                     CG
                          LEU
                                 360
                                            22. 143
      atom
              2774
15
                                                      -0.372
                                                                         1. 00 29. 93
                                                               29. 248
                                 360
                                            21. 973
              2775
                     CD1 LEU
      atom
                                                               31. 727
                     CD2 LEU
                                 360
                                            22. 365
                                                      -0.420
                                                                         1. 00 36. 42
              2776
      atom
                                                      -3.882
                                                               29. 146
                                                                         1. 00 36. 90
                                 360
                                            21.875
              2777
                     C
                          LEU
      atom
                                                               28. 177
                                                                         1.00 38.17
                                 360
                                            22. 551
                                                      -3.552
                          LEU
              2778
                     0
      atom
                                                               29. 942
                                                                         1. 00 37. 83
                     N
                          GLU
                                  361
                                            22. 194
                                                      -4. 893
               2779
20
      atom
                                                               29.744
                                                                         1. 00 35. 87
                                                      -5. 717
                                  361
                                            23. 377
      atom
               2780
                     CA
                          GLU
                                                      -6.785
                                                               30. 849
                                                                         1.00 34.29
                                  361
                                            23. 416
               2781
                     CB
                          GLU
      atom
                                                                         1. 00 32. 02
                                                      -7.694
                                                               30.868
               2782
                     CG
                          GLU
                                  361
                                            24. 650
      atom
                                                      -8.475
                                                               32. 178
                                                                         1. 00 36. 91
                                  361
                                            24. 779
               2783
                      CD
                          GLU
      atom
                                                                         1.00 36.54
                                  361
                                            24. 869
                                                      -9.725
                                                               32. 113
               2784
                      OE1 GLU
       atom
25
                                                      -7.842
                                                                33. 271
                                                                         1. 00 34. 86
                                             24. 789
               2785
                      OE2 GLU
                                  361
       atom
                                                                28. 355
                                                                         1. 00 37. 17
                                                      -6.384
                                  361
                                             23. 415
               2786
                      C
                           GLU
       atom
                                            24. 481
                                                                         1. 00 37. 31
                                  361
                                                      -6.547
                                                                27. 769
               2787
                      0
                           GLU
       atom
                                                                27. 826
                                                                         1. 00 39. 56
                      N
                           LEU
                                  362
                                             22. 254
                                                      -6. 756
               2788
       atom
                                                      -7.429
                                                                26. 529
                                                                         1. 00 40. 91
                                  362
                                             22. 195
               2789
                          LEU
                      CA
30
       atom
                                                      -8. 298
                                                                26. 442
                                                                         1. 00 42. 13
                      CB
                           LEU
                                  362
                                             20. 932
               2790
       atom
                                                                27. 229
                                                                         1. 00 43. 71
                                                      -9.614
                                             21. 081
               2791
                      CG
                           LEU
                                  362
       atom
                                                                28.708
                                                                         1. 00 43. 86
                                             20.850
                                                      -9.356
                                  362
               2792
                      CD1 LEU
       atom
                                                                         1. 00 42. 44
                                             20. 106 -10. 654
                                                                26. 729
               2793
                      CD2 LEU
                                  362
       atom
                                                                25. 329
                                                                         1. 00 38. 74
                           LEU
                                  362
                                             22. 279
                                                      -6.497
               2794
                      C
       atom
35
                                                                24. 189
                                                                         1. 00 34. 53
                                                      -6.945
                                  362
                                             22. 270
               2795
                      0
                           LEU
       atom
```

```
1. 00 35. 68
                                                    -5. 199
                                                              25. 588
                                 363
                                           22. 375
                          ILE
      atom
              2796
                     N
                                                                        1.00 33.38
                                            22. 493
                                                     -4.246
                                                              24. 507
                                 363
              2797
                     CA
                          ILE
      atom
                                                                        1.00 31.46
                                                     -2.870
                                                              24. 889
                          ILE
                                 363
                                            21. 907
              2798
                     CB
      atom
                                                                        1. 00 25. 00
                                                     -1.849
                                                              23. 766
                                 363
                                            22. 167
      atom
              2799
                     CG2 ILE
                                                                        1.00 33.04
                                                               25. 153
                     CG1 ILE
                                 363
                                            20. 406
                                                     -3.015
              2800
 5
      atom
                                                     -1.853
                                                               25. 910
                                                                        1. 00 32. 87
                     CD1 ILE
                                 363
                                            19. 783
              2801
      atom
                                                               24. 202
                                                                        1. 00 33. 97
                                            23. 966
                                                     -4.082
                                 363
              2802
                     C
                          ILE
      atom
                                                     -3.379
                                                               24. 922
                                                                        1.00 35.19
                                 363
                                            24. 668
                          ILE
              2803
                     0
      atom
                                                               23. 156
                                                                        1. 00 36. 06
                          THR
                                 364
                                            24. 453
                                                     -4. 739
              2804
                     N
      atom
                                                                        1. 00 38. 67
                                                     -4. 580
                                                               22. 825
                     CA
                          THR
                                 364
                                            25. 860
      atom
              2805
10
                                                                        1.00 38.78
                                            26. 496
                                                     -5. 893
                                                               22. 330
                     CB
                          THR
                                 364
              2806
      atom
                                                               21. 100
                                                                        1. 00 39. 96
                                                     -5.659
              2807
                     OG1 THR
                                 364
                                            27. 191
      atom
                                                                        1. 00 42. 76
                                                               22. 146
                                            25. 436
                                                     -6.964
                     CG2 THR
                                 364
              2808
      atom
                                            25. 946
                                                     -3.501
                                                               21.760
                                                                        1.00 41.16
                     C
                                 364
              2809
                          THR
      atom
                                                                        1. 00 42. 45
                                                     -3.444
                                                               20. 865
                     0
                          THR
                                 364
                                            25. 108
      atom
              2810
15
                                                                        1. 00 43. 05
                                                               21. 889
                                 365
                                            26. 940
                                                     -2. 624
              2811
                     N
                          SER
      atom
                          SER
                                 365
                                            27. 134
                                                     -1. 515
                                                               20. 963
                                                                        1. 00 43. 64
              2812
                     CA
      atom
                                                     -0.298
                                                               21. 435
                                                                        1. 00 43. 29
                                 365
                                            26. 338
              2813
                     CB
                          SER
      atom
                                                       0.807
                                                               21.650
                                                                        1.00 47.26
                                 365
                                            27. 194
                     0G
                          SER
              2814
      atom
                                                                        1.00 44.44
                                                               20.899
                     C
                                 365
                                            28. 616
                                                     -1.176
              2815
                          SER
20
      atom
                                                               21. 939
                                                                        1. 00 42. 95
                                                     -1.050
                                 365
                                            29. 278
      atom
              2816
                     0
                          SER
                                                     -1.014
                                                               19.676
                                                                        1. 00 44. 33
                                 366
                                            29. 121
              2817
                     N
                          CYS
      atom
                                                                        1. 00 41. 74
                                                      -0.734
                                                               19. 444
              2818
                     CA
                          CYS
                                 366
                                            30. 535
      atom
                                                       0. 377
                                                               20. 363
                                                                         1. 00 42. 48
                     CB
                          CYS
                                  366
                                            31. 041
              2819
      atom
                                                               19.903
                                                                         1. 00 37. 51
                          CYS
                                  366
                                            30. 515
                                                       2. 037
              2820
                      SG
      atom
25
                                                                         1. 00 42. 11
                                                      -2.036
                                                               19. 773
                                  366
                                            31. 250
               2821
                      C
                          CYS
      atom
                                                      -2. 052
                                                               20. 392
                                                                         1. 00 38. 89
                          CYS
                                  366
                                            32. 321
               2822
                      0
      atom
                                                               19. 361
                                                                         1. 00 41. 96
                                  367
                                            30. 617
                                                      -3.128
               2823
                      N
                           SER
      atom
                                                               19. 589
                                                                         1. 00 45. 83
               2824
                          SER
                                  367
                                            31. 134
                                                      -4. 466
      atom
                      CA
                                                      -4.656
                                                               18. 791
                                                                         1. 00 47. 19
                                  367
                                            32. 423
               2825
                      CB
                           SER
30
       atom
                                                                         1.00 53.00
                                                               17. 537
               2826
                      0G
                          SER
                                  367
                                            32. 141
                                                      -5.257
      atom
                                                               21.071
                                                                         1. 00 45. 17
                                                      -4.789
                                  367
                                            31. 375
               2827
                      C
                           SER
       atom
                                                      -5. 686
                                                               21. 381
                                                                         1. 00 41. 42
                                            32. 167
                                  367
               2828
                      0
                           SER
       atom
                                                                         1. 00 42. 35
                                  368
                                            30. 687
                                                      -4.070
                                                               21. 967
               2829
                      N
                           SER
       atom
                                                               23. 418
                                                                         1. 00 41. 58
               2830
                                  368
                                            30. 829
                                                      -4. 268
                      CA
                           SER
35
       atom
                                                               23. 952
                                                                         1. 00 38. 01
                                                      -3.428
                      CB
                           SER
                                  368
                                            31. 988
               2831
       atom
```

```
24. 035
                                                                         1. 00 35. 59
                                                     -2.077
                                 368
                                            31. 614
      atom
              2832
                     0G
                          SER
                                                      -3.930
                                                               24. 193
                                                                         1. 00 39. 93
                                 368
                                            29. 554
              2833
                     C
                          SER
      atom
                                            28. 644
                                                      -3.323
                                                               23. 648
                                                                         1. 00 45. 35
              2834
                     0
                          SER
                                 368
      atom
                                                      -4. 315
                                                               25. 465
                                                                         1. 00 37. 24
                                            29. 489
      atom
              2835
                     N
                          ASN
                                 369
                          ASN
                                 369
                                            28. 292
                                                     -4.064
                                                               26. 275
                                                                         1. 00 36. 60
              2836
                     CA
 5
      atom
                                                               26. 268
                                                                         1. 00 31. 85
                          ASN
                                 369
                                            27. 423
                                                      -5.307
              2837
                     CB
      atom
                                                               26. 917
                                                                         1. 00 35. 41
                                            28. 114
                                                      -6.459
              2838
                     CG
                          ASN
                                  369
      atom
                                                                         1.00 29.53
                                                      -7.021
                                                                26. 344
                     OD1 ASN
                                  369
                                            29. 050
              2839
      atom
                                            27. 692
                                                      -6. 807
                                                                28. 136
                                                                         1. 00 31. 65
              2840
                     ND2 ASN
                                  369
      atom
                                                               27. 737
                                                                         1. 00 30. 94
                          ASN
                                  369
                                            28. 537
                                                      -3.650
              2841
                     C
10
      atom
                                            29.665
                                                      -3.589
                                                                28. 203
                                                                         1. 00 34. 12
                          ASN
                                  369
              2842
                     0
      atom
                                                      -3. 381
                                                                28. 453
                                                                         1. 00 30. 55
                          VAL
                                  370
                                            27. 453
              2843
                     N
      atom
                                                                29.850
                                                                         1. 00 24. 47
                                                      -2.948
                                  370
                                            27. 508
              2844
                     CA
                          VAL
      atom
                                                                30. 166
                                                                         1. 00 27. 62
                                            26. 425
                                                      -1.882
                     CB
                          VAL
                                  370
              2845
      atom
                                                                31. 672
                                                                         1. 00 30. 91
                     CG1 VAL
                                  370
                                            26. 311
                                                      -1.705
      atom
              2846
15
                                                                29. 495
                                                                         1. 00 24. 11
                                            26. 758
                                                      -0.549
              2847
                     CG2 VAL
                                  370
      atom
                                  370
                                            27. 248
                                                      -4.109
                                                                30. 776
                                                                         1. 00 23. 63
                     C
                          VAL
              2848
      atom
                                                                         1. 00 22. 44
                                             26. 241
                                                      -4.799
                                                                30. 640
              2849
                     0
                          VAL
                                  370
      atom
                                                                31.739
                                                                         1. 00 22. 16
                                             28. 136
                                                      -4.313
                                  371
               2850
                          SER
      atom
                     N
                                                                          1. 00 22. 77
                                  371
                                             27. 956
                                                      -5.410
                                                                32. 676
                     CA
                          SER
              2851
20
      atom
                                                                          1. 00 24. 91
                                                                32. 309
                                             28. 886
                                                      -6.575
      atom
               2852
                     CB
                          SER
                                  371
                                                                33. 040
                                                                          1.00 22.94
                                             28. 557
                                                      -7. 746
               2853
                      0G
                          SER
                                  371
      atom
                                                                34. 121
                                                                          1. 00 22. 34
               2854
                     C
                           SER
                                  371
                                             28. 214
                                                      -4.976
      atom
                                                                34. 384
                                                                          1. 00 20. 05
                                  371
                                             28. 838
                                                      -3.932
                           SER
      atom
               2855
                      0
                                             27. 745
                                                      -5.800
                                                                35.056
                                                                          1. 00 21. 56
                           VAL
                                  372
               2856
                      N
      atom
25
                                                                36. 473
                                                                          1. 00 15. 57
                                             27. 898
                                                      -5. 509
               2857
                      CA
                           VAL
                                  372
      atom
                                                                37. 207
                                                                          1. 00 19. 67
                                                      -5. 566
                                  372
                                             26. 561
               2858
                      CB
                          VAL
      atom
                                                                          1. 00 26. 20
                                  372
                                             26. 720
                                                      -4.920
                                                                38. 592
               2859
                      CG1 VAL
      atom
                                                                          1. 00 10. 49
                      CG2 VAL
                                  372
                                             25. 471
                                                      -4. 875
                                                                36. 402
               2860
      atom
                                                                37. 221
                                                                          1. 00 15. 58
                                                      -6.431
                           VAL
                                  372
                                             28. 832
               2861
                      C
30
      atom
                                                                          1. 00 14. 13
                                  372
                                             28. 930
                                                      -7.627
                                                                36. 922
               2862
                      0
                           VAL
      atom
                                                                          1.00 16.39
                                                                38. 196
                                             29. 520
                                                      -5. 845
               2863
                      N
                           ALA
                                  373
      atom
                                                                39. 074
                                                                          1. 00 18. 31
                                                      -6. 563
                                  373
                                             30. 438
               2864
                      CA
                           ALA
      atom
                                             31. 826
                                                      -6. 545
                                                                38. 495
                                                                          1. 00 16. 15
               2865
                      CB
                           ALA
                                  373
       atom
                                  373
                                             30. 416
                                                      -5. 854
                                                                40. 438
                                                                          1. 00 20. 53
               2866
                      C
                           ALA
       atom
35
                                                                          1. 00 26. 41
                                                      -4.963
                                                                40. 667
                                  373
                                             29. 603
               2867
                      0
                           ALA
       atom
```

```
1. 00 23. 28
                                           31. 302
                                                    -6. 233
                                                              41. 347
                         HIS
                                 374
              2868
                     N
      atom
                                                     -5.589
                                                              42. 654
                                                                       1. 00 21. 68
                         HIS
                                 374
                                           31. 333
                     CA
              2869
      atom
                                                                        1. 00 23. 76
                     CB
                         HIS
                                           30.696
                                                     -6.495
                                                              43. 685
              2870
                                 374
      atom
                                                              43. 487
                                                                        1. 00 23. 91
                                           29. 232
                                                     -6. 653
      atom
              2871
                     CG HIS
                                 374
                                                                        1. 00 25. 69
                     CD2 HIS
                                 374
                                           28. 196
                                                    -5. 868
                                                              43. 863
              2872
 5
      atom
                                                              42. 732
                                                                        1. 00 26. 95
                     ND1 HIS
                                 374
                                           28.694
                                                     -7.672
              2873
      atom
                                                     -7. 507
                                                              42.650
                                                                        1.00 29.89
                                           27. 386
              2874
                     CE1 HIS
                                 374
      atom
                                                              43. 327
                                                                        1.00 29.47
                                                     -6.420
                     NE2 HIS
                                 374
                                           27. 058
              2875
      atom
                                                                        1. 00 21. 80
                                            32. 732
                                                     -5.231
                                                              43.070
              2876
                     C
                         HIS
                                 374
      atom
                                                                        1. 00 21. 70
                         HIS
                                 374
                                            33.660
                                                     -6.002
                                                              42. 859
              2877
                     0
10
      atom
                                            32. 893
                                                     -4.064
                                                              43.675
                                                                        1. 00 24. 44
                          ASP
                                 375
              2878
                     N
      atom
                                                              44. 070
                                                                        1. 00 28. 87
                         ASP
                                 375
                                            34. 228
                                                     -3.644
              2879
                     CA
      atom
                                                                        1. 00 26. 72
                                                              43. 963
                                 375
                                            34. 365
                                                     -2. 128
              2880
                     CB
                         ASP
      atom
                                                              45. 274
                                                                        1.00 35.28
                          ASP
                                 375
                                            34. 061
                                                     -1. 422
                     CG
              2881
      atom
                                                              45. 763
                                                                        1. 00 34. 88
                     OD1 ASP
                                 375
                                            32. 918
                                                     -1.530
      atom
              2882
15
                                                              45. 820
                                                                        1. 00 41. 21
                                            34. 971
                                                     -0.762
              2883
                     OD2 ASP
                                 375
      atom
                          ASP
                                 375
                                            34. 624
                                                     -4. 112
                                                              45. 471
                                                                        1. 00 32. 70
              2884
                     C
      atom
                                                              46.062
                                                                        1.00 31.75
                                            33. 977
                                                     -4.977
              2885
                     0
                          ASP
                                 375
      atom
                                                              45. 961
                                                                        1. 00 37. 02
                                            35. 724
                                                     -3.549
                                 376
              2886
                          ALA
      atom
                     N
                                                                        1.00 36.04
                                 376
                                            36. 280
                                                     -3.854
                                                              47. 268
              2887
                     CA
                          ALA
20
      atom
                                                               47. 558
                                                                        1. 00 35. 93
                                            37. 426
                                                     -2. 890
      atom
              2888
                     CB
                          ALA
                                 376
                                                               48. 368
                                                                        1. 00 38. 47
                                 376
                                            35. 227
                                                     -3.765
              2889
                     C
                          ALA
      atom
                                                               49. 158
                                                                        1. 00 40. 65
              2890
                     0
                          ALA
                                 376
                                            35. 063
                                                     -4.700
      atom
                                                     -2.636
                                                               48. 418
                                                                        1.00 36.68
                                 377
                                            34. 522
              2891
                          SER
      atom
                     N
                                                                        1.00 36.49
                                 377
                                            33. 486
                                                     -2.408
                                                               49. 421
              2892
                     CA
                          SER
      atom
25
                                                               49. 597
                                                                        1. 00 37. 48
                                            33. 243
                                                     -0.906
              2893
                     CB
                          SER
                                 377
      atom
                                                                        1. 00 39. 42
                                                               48. 709
                                 377
                                            32. 235
                                                     -0.446
              2894
                     0G
                          SER
      atom
                                 377
                                            32. 174
                                                     -3.088
                                                               49. 060
                                                                        1. 00 35. 46
              2895
                     C
                          SER
      atom
                                                                        1. 00 40. 61
                          SER
                                 377
                                            31. 138
                                                     -2.804
                                                               49. 655
              2896
                     0
      atom
                                                               48.071
                                                                        1. 00 31. 94
                                 378
                                                     -3.968
              2897
                          GLY
                                            32. 218
                     N
30
      atom
                                                                        1.00 30.54
                     CA
                          GLY
                                 378
                                            31. 031
                                                     -4.694
                                                               47. 656
              2898
      atom
                                                               46. 985
                                                                        1. 00 29. 00
                          GLY
                                 378
                                            29. 927
                                                     -3.897
              2899
                     C
      atom
                                                                        1.00 29.96
                                                     -4.407
                                                               46. 741
                                 378
                                            28. 841
              2900
                     0
                          GLY
      atom
                                            30. 181
                                                     -2. 639
                                                               46. 686
                                                                        1. 00 31. 48
              2901
                     N
                          LYS
                                 379
      atom
                                                                        1. 00 35. 92
                          LYS
                                 379
                                            29. 157
                                                      -1.850
                                                               46. 036
               2902
                     CA
35
      atom
                                                                        1.00 38.88
                                                      -0.361
                                                               46. 194
                     CB
                                 379
                                            29. 458
               2903
                          LYS
      atom
```

	atom	2904	CG	LYS	379	28. 219	0. 535	46. 092	1. 00 46. 72
	atom	2905	CD	LYS	379	28. 395	1. 885	46. 812	1. 00 49. 32
	atom	2906	CE	LYS	379	29. 863	2. 313	46. 891	1. 00 52. 18
	atom	2907	NZ	LYS	379	30. 492	1. 882	48. 176	1. 00 50. 19
5	atom	2908	С	LYS	379	29. 128	-2. 234	44. 555	1. 00 36. 66
	atom	2909	0	LYS	379	30. 180	-2. 461	43. 931	1. 00 33. 38
	atom	2910	N.	ARG	380	27. 923	-2. 320	44. 001	1. 00 33. 24
	atom	2911	CA	ARG	380	27. 769	-2. 663	42. 598	1. 00 31. 43
	atom	2912	CB	ARG	380	26. 283	-2. 688	42. 216	1. 00 28. 74
10	atom	2913	CG	ARG	380	25. 776	-4 . 105	41. 995	1. 00 31. 92
	atom	2914	CD	ARG	380	24. 294	-4 . 180	41. 834	1. 00 29. 13
	atom	2915	NE	ARG	380	23. 707	-2. 877	41. 580	1. 00 37. 71
	atom	2916	CZ	ARG	380	23. 446	-2. 397	40. 370	1. 00 44. 95
	atom	2917	NH1	ARG	380	23. 727	-3. 122	39. 291	1. 00 44. 04
15	atom	2918	NH2	ARG	380	22. 876	-1. 198	40. 239	1. 00 46. 73
	atom	2919	С	ARG	380	28. 514	-1. 682	41. 700	1. 00 30. 44
	atom	2920	0	ARG	380	28. 505	-0. 480	41. 941	1. 00 30. 65
	atom	2921	N	VAL	381	29. 185	-2. 207	40. 680	1. 00 28. 65
	atom	2922	CA	VAL	381	29. 908	-1. 366	39. 736	1. 00 25. 65
20	atom	2923	CB	VAL	381	31. 431	-1. 334	40. 028	1. 00 24. 97
	atom	2924	CG1	VAL	381	32. 146	-0. 472	38. 976	1. 00 27. 18
	atom	2925	CG2	VAL	381	31. 683	-0. 758	41. 417	1. 00 21. 96
	atom	2926	C	VAL	381	29. 671	-1. 827	38. 289	1. 00 25. 25
	atom	2927	0	VAL	381	29. 862	-3. 003	37. 927	1. 00 24. 76
2 5	atom	2928	N	TYR	382	29. 229	-0. 878	37. 477	1. 00 20. 70
	atom	2929	CA	TYR	382	28. 960	-1. 113	36. 069	1. 00 22. 49
	atom	2930	CB	TYR	382	27. 831	-0. 198	35. 603	1. 00 19. 31
	atom	2931	CG	TYR	382	26. 470	-0. 566	36. 127	1. 00 19. 83
	atom	2932	CD1	TYR	382	25. 954	0. 048	37. 275	1. 00 23. 95
3 0	atom	2933	CE1	TYR	382	24. 647	-0. 207	37. 707	1. 00 23. 01
	atom	2934	CD2	TYR	382	25. 653	-1. 453	35. 428	1. 00 15. 52
	atom	2935	CE2	TYR	382	24. 348	-1. 718	35. 841	1. 00 16. 17
	atom	2936	CZ	TYR	382	23. 847	-1. 083	36. 980	1. 00 24. 06
	atom	2937	OH	TYR	382	22. 539	-1. 289	37. 367	1. 00 27. 97
3 5	atom	2938	С	TYR	382	30. 222	-0. 797	35. 268	1. 00 20. 28
	atom	2939	0	TYR	382	30. 849	0. 228	35. 494	1. 00 17. 61

```
34. 333
                                                                       1.00 22.04
                                           30. 577 -1. 679
              2940
                     N
                         TYR
                                383
      atom
                                                              33. 480
                                                                       1. 00 17. 05
                         TYR
                                383
                                           31. 759
                                                    -1. 498
      atom
              2941
                     CA
                                                              34.066
                                                    -2.279
                                                                       1. 00 14. 01
                         TYR
                                383
                                           32. 930
              2942
                     CB
      atom
                                                              33. 968
                                                                       1.00 15.16
              2943
                     CG
                         TYR
                                383
                                           32. 781
                                                    -3. 782
      atom
                                           31.806
                                                    -4. 463
                                                              34. 725
                                                                       1. 00 12. 97
                     CD1 TYR
                                383
              2944
      atom
 5
                                           31.650
                                                    -5. 861
                                                              34.630
                                                                       1. 00 6. 21
                     CE1 TYR
                                383
              2945
      atom
                                                    -4.536
                                                              33. 111
                                                                       1. 00 9. 83
                     CD2 TYR
                                 383
                                           33.608
              2946
      atom
                                                                       1. 00 7. 71
                                                    -5.920
                                                              33. 013
                     CE2 TYR
                                 383
                                           33. 461
      atom
              2947
                                                                       1. 00 10. 71
                                                              33. 769
                     CZ
                         TYR
                                 383
                                           32. 482
                                                    -6. 570
              2948
      atom
                                           32. 324
                                                    -7. 918
                                                              33. 628
                                                                       1. 00 17. 89
              2949
                     0H
                         TYR
                                 383
      atom
10
                                                    -1. 936 32. 006
                                                                       1. 00 18. 86
                          TYR
                                 383
                                           31. 539
              2950
                     C
      atom
                                                              31. 682
                                           30.604
                                                    -2.676
                                                                       1. 00 9. 75
                          TYR
                                 383
              2951
                     0
      atom
                                                                       1.00 20.41
                                                    -1.468
                                                              31. 133
              2952
                          LEU
                                 384
                                           32. 428
      atom
                                                                       1.00 22.72
                                                    -1. 761
                                                              29. 700
                                           32. 387
              2953
                     CA
                         LEU
                                 384
      atom
                                                                       1. 00 27. 28
                                           33. 089
                                                    -0.653
                                                              28. 906
              2954
                     CB
                         LEU
                                 384
      atom
15
                                                                       1. 00 33. 06
                         LEU
                                 384
                                           32. 206
                                                      0. 373
                                                              28. 189
              2955
                     CG
      atom
                                                      1. 244
                                                              27. 233
                                                                       1. 00 34. 76
                     CD1 LEU
                                 384
                                           33.065
              2956
      atom
                                                              27. 442
                                                                       1. 00 21. 43
                     CD2 LEU
                                 384
                                           31. 112
                                                     -0.361
              2957
      atom
                                                                       1.00 23.29
                                                     -3.066
                                                              29. 392
                                           33. 091
              2958
                     C
                          LEU
                                 384
      atom
                                                    -3.224
                                                              29. 672
                                                                       1.00 16.65
                          LEU
                                 384
                                           34. 285
              2959
                     0
20
      atom
                                                              28.803
                                                                       1. 00 20. 42
              2960
                     N
                          THR
                                 385
                                           32. 368
                                                     -4.002
      atom
                                                                       1. 00 25. 24
                          THR
                                 385
                                           33. 006
                                                    -5. 257
                                                              28. 488
              2961
                     CA
      atom
                     CB
                          THR
                                 385
                                           32. 725
                                                     -6.312
                                                              29.566
                                                                       1. 00 24. 34
              2962
      atom
                                                              29. 500
                                                                       1. 00 25. 86
                                 385
                                            33. 725
                                                     -7.341
              2963
                     OG1 THR
      atom
                                                                       1. 00 25. 15
                                            31. 365
                                                     -6.920
                                                              29. 353
              2964
                     CG2 THR
                                 385
25
      atom
                                                                       1. 00 28. 01
                     C
                          THR
                                 385
                                            32. 625
                                                     -5.803
                                                              27. 115
              2965
      atom
                                                                       1. 00 27. 17
                                                              26. 371
                                 385
                                            31. 850
                                                     -5. 190
      atom
              2966
                     0
                          THR
                                                              26. 788
                                                                       1. 00 29. 12
              2967
                          ARG
                                 386
                                            33. 151
                                                     -6.976
                     N
      atom
                                            32.886
                                                     -7. 513
                                                              25. 479
                                                                       1. 00 27. 83
              2968
                     CA
                          ARG
                                 386
      atom
                                                                        1. 00 27. 61
                                                     -6.542
                                                              24. 501
              2969
                     CB
                          ARG
                                 386
                                            33. 539
      atom
30
                                                              23. 168
                                                                        1.00 31.30
                                 386
                                            33. 829
                                                     -7.097
              2970
                     CG
                          ARG
      atom
                                                              22. 857
                                                                        1. 00 23. 16
                     CD
                          ARG
                                 386
                                            35. 308
                                                     -7. 124
              2971
      atom
                                                                        1. 00 16. 35
                                                              21. 577
                                 386
                                            35. 409
                                                     -7.801
      atom
              2972
                     NE
                          ARG
                                                                        1. 00 12. 96
                     CZ
                          ARG
                                 386
                                            35. 558
                                                     -7. 169
                                                              20. 428
              2973
      atom
                                                              20. 419
                                                                        1. 00 12. 85
              2974
                     NH1 ARG
                                 386
                                            35. 634
                                                     -5. 839
      atom
3 5
                                                              19. 294
                                                                       1. 00 15. 28
                                 386
                                            35. 542
                                                     -7. 860
      atom
              2975
                     NH2 ARG
```

```
1.00 27.06
                                                       -8. 940
                                                                 25. 299
               2976
                      C
                           ARG
                                   386
                                              33. 418
      atom
                                                                            1. 00 25. 84
                                                       -9. 428
                                                                 26. 117
                                   386
                                              34. 192
                           ARG
      atom
               2977
                      0
                                                       -9. 613
                                                                  24. 242
                                                                            1. 00 27. 53
                           ASP
                                   387
                                              32. 968
               2978
                      N
      atom
                                                                            1. 00 24. 59
                                              33. 450 -10. 958
                                                                  23. 924
               2979
                      CA
                           ASP
                                   387
      atom
                                              32. 841 -11. 422
                                                                  22. 615
                                                                            1. 00 24. 42
                           ASP
                                   387
               2980
                      CB
      atom
 5
                                                                            1. 00 22. 95
                                              33. 009 -12. 888
                                                                  22. 400
                      CG
                           ASP
                                   387
               2981
      atom
                                                                            1. 00 23. 62
                                              32. 016 -13. 604
                                                                  22. 563
                      OD1 ASP
                                   387
               2982
      atom
                                                                            1. 00 27. 28
                                                                  22. 072
                                              34. 134 -13. 329
                      OD2 ASP
                                   387
      atom
               2983
                                              34. 966 -10. 785
                                                                  23. 765
                                                                            1. 00 23. 96
               2984
                      C
                           ASP
                                   387
      atom
                                              35. 424 -9. 879
                                                                  23. 071
                                                                            1. 00 22. 34
               2985
                      0
                           ASP
                                   387
      atom
10
                                                                  24. 379
                                                                            1. 00 19. 21
                                              35. 764 -11. 665
                           PR<sub>0</sub>
                                   388
               2986
                      N
      atom
                                                                            1. 00 20. 90
                                   388
                                              35. 473 −12. 838
                                                                  25. 222
               2987
                           PR<sub>0</sub>
                      CD
      atom
                                                                            1.00 20.36
                                                                  24. 242
                                              37. 199 -11. 474
               2988
                      CA
                           PR<sub>0</sub>
                                   388
      atom
                                                                            1. 00 15. 78
                                              37. 714 -11. 909
                                                                  25. 611
                                   388
               2989
                      CB
                           PR0
      atom
                                                                            1. 00 10. 82
                                   388
                                              36. 797 −13. 039
                                                                  25. 993
               2990
                      CG
                           PR0
      atom
15
                                                                            1. 00 22. 20
                                                                  23. 107
                           PR<sub>0</sub>
                                   388
                                              37. 897 −12. 209
               2991
                      C
      atom
                                              39. 105 -12. 068
                                                                  22. 936
                                                                            1. 00 27. 27
                           PR<sub>0</sub>
                                   388
               2992
                      0
      atom
                                                                            1.00 21.30
                                                                  22. 341
               2993
                           THR
                                   389
                                              37. 147 −12. 986
                      N
      atom
                                                                            1.00 20.33
                                                                  21. 233
                                   389
                                              37. 707 -13. 756
               2994
                      CA
                           THR
      atom
                                              36. 572 -14. 319
                                                                  20. 365
                                                                            1. 00 22. 95
                           THR
                                   389
               2995
                      CB
20
      atom
                                                                            1. 00 16. 21
                                                                  21.074
               2996
                      OG1 THR
                                   389
                                              35. 905 −15. 371
      atom
                                                                            1. 00 24. 76
                                                                  19. 059
               2997
                      CG2 THR
                                   389
                                              37. 116 -14. 857
      atom
                      C
                           THR
                                   389
                                              38. 714 -13. 017
                                                                  20. 333
                                                                            1. 00 21. 29
               2998
       atom
                                                                            1. 00 25. 30
                                              39. 837 -13. 472
                                                                  20. 135
                                   389
       atom
               2999
                      0
                           THR
                                                                  19.790
                                                                            1.00 21.06
                                   390
                                              38. 314 -11. 879
               3000
                           THR
                       N
25
       atom
                                                                            1. 00 20. 45
                                                                  18. 907
                                   390
                                              39. 189 -11. 112
               3001
                       CA
                           THR
       atom
                                                                            1. 00 22. 74
                                              38. 366 -9. 966
                                                                  18. 182
                       CB
                                   390
       atom
               3002
                            THR
                                                                  17. 309
                                                                            1. 00 15. 53
               3003
                       OG1 THR
                                   390
                                              37. 404 -10. 571
       atom
                                   390
                                              39. 276 -9. 031
                                                                  17. 364
                                                                            1. 00 9. 68
               3004
                       CG2 THR
       atom
                                                                  19. 625
                                                                            1. 00 21. 65
                                   390
                                              40. 424 -10. 547
               3005
                       C
                            THR
       atom
30
                                   390
                                              41. 555 -10. 778
                                                                  19. 192
                                                                            1. 00 26. 77
               3006
                       0
                            THR
       atom
                                                                             1. 00 20. 31
                                                                  20. 711
               3007
                       N
                            PR<sub>0</sub>
                                   391
                                              40. 232
                                                        -9. 781
       atom
                                                                  21. 336
                                                                             1. 00 24. 13
                                                        -9. 345
                                   391
                                               38. 970
       atom
                3008
                       CD
                            PR0
                                                                  21. 410
                                                                             1. 00 18. 82
                3009
                       CA
                            PR<sub>0</sub>
                                   391
                                               41. 405
                                                        -9. 241
       atom
                                                                             1. 00 19. 00
                                               40. 820
                                                        -8.613
                                                                  22. 671
                3010
                       CB
                            PR<sub>0</sub>
                                   391
35
       atom
                                                                             1. 00 22. 38
                                                        -8.283
                                                                  22. 309
                                   391
                                               39. 420
                3011
                       CG
                            PR0
       atom
```

```
21. 751
                                                                         1. 00 19. 91
                                            42. 391 -10. 359
                          PR<sub>0</sub>
                                 391
              3012
                    C
      atom
                                            43. 597 -10. 187
                                                               21.684
                                                                         1.00 21.23
                          PR<sub>0</sub>
                                 391
              3013
                     0
      atom
                                                                         1. 00 20. 70
                                            41. 856 -11. 511
                                                               22. 127
                     N
                          LEU
                                 392
              3014
      atom
                                                               22. 458
                                                                         1. 00 20. 82
                                            42. 692 -12. 650
              3015
                     CA
                          LEU
                                 392
      atom
                                 392
                                            41. 841 -13. 759
                                                               23. 073
                                                                         1.00 17 55
                     CB
                          LEU
              3016
 5
      atom
                                                               24. 478
                                                                         1.00 21.46
                         LEU
                                 392
                                            41. 345 -13. 392
                     CG
              3017
      atom
                                                               25. 205
                                                                         1. 00 15. 26
                                            40. 825 -14. 630
              3018
                     CD1 LEU
                                 392
      atom
                                                               25. 250
                                                                         1. 00 15. 90
                                            42. 485 -12. 737
                     CD2 LEU
                                 392
      atom
              3019
                                                                         1.00 24.09
                                            43. 416 -13. 148
                                                               21. 204
              3020
                     C
                          LEU
                                 392
      atom
                                                                21. 188
                                                                         1. 00 23. 77
                                 392
                                            44. 650 -13. 216
              3021
                     0
                          LEU
      atom
10
                                                                20. 151
                                                                         1. 00 17. 72
                                 393
                                            42. 664 -13. 472
              3022
                          ALA
                     N
      atom
                                                                18. 936
                                                                         1. 00 16. 17
                          ALA
                                 393
                                             43. 297 -13. 951
              3023
                     CA
      atom
                                                                         1. 00 22. 26
                                                                17.869
                                  393
                                             42. 258 -14. 247
               3024
                     CB
                          ALA
      atom
                                                                18. 436
                                                                         1.00 12.90
                                  393
                                             44. 293 -12. 917
               3025
                     C
                          ALA
      atom
                                                                         1. 00 13. 43
                                  393
                                             45. 385 -13. 261
                                                                18. 017
               3026
                      0
                          ALA
15
      atom
                                                                18. 489
                                                                         1. 00 14. 42
               3027
                          ARG
                                  394
                                             43. 931 -11. 645
                      N
      atom
                                  394
                                             44. 846 -10. 624
                                                                18. 021
                                                                         1. 00 17. 59
               3028
                          ARG
                      CA
      atom
                                                                17. 943
                                                                         1.00 14.82
                                             44. 150 -9. 256
               3029
                      CB
                          ARG
                                  394
      atom
                                                                16.962
                                                                         1.00 16.07
                                                      -9. 215
                                  394
                                             42. 984
                      CG
                          ARG
      atom
               3030
                                  394
                                             42. 631
                                                      -7.760
                                                                16. 526
                                                                         1. 00 12. 41
                      CD
                          ARG
               3031
20
      atom
                                                                15. 413
                                                                         1. 00 14. 24
                                                      -7. 773
      atom
               3032
                      NE
                          ARG
                                  394
                                             41. 684
                                                                15. 087
                                                                         1. 00 17. 39
                                  394
                                             40. 850 -6. 787
               3033
                      CZ
                          ARG
      atom
                                                                15. 781
                                                                         1. 00 10. 53
               3034
                      NH1 ARG
                                  394
                                             40. 817
                                                      -5.667
       atom
                                             40.019 -6.940
                                                                14.066
                                                                         1. 00 20. 76
                                  394
                      NH2 ARG
       atom
               3035
                                                                          1.00 22.24
                                             46. 004 -10. 594
                                                                19.016
                                  394
               3036
                      C
                           ARG
25
       atom
                                                                18.655
                                                                         1. 00 26. 32
                                             47. 155 -10. 344
               3037
                      0
                           ARG
                                  394
       atom
                                                                          1.00 24.17
                                                                20. 274
                                  395
                                             45. 685 -10. 866
                           ALA
       atom
               3038
                      N
                                                                          1. 00 22. 92
                                             46. 683 -10. 893
                                                                21. 330
               3039
                      CA
                           ALA
                                  395
       atom
                                                                          1.00 21.94
                                  395
                                             46. 023 -11. 255
                                                                22. 648
               3040
                      CB
                           ALA
       atom
                                                                20. 955
                                                                          1. 00 21. 60
                                             47. 737 -11. 929
                                  395
               3041
                      C
                           ALA
30
       atom
                                                                          1. 00 26. 01
                                  395
                                             48. 914 -11. 617
                                                                20.853
                           ALA
               3042
                      0
       atom
                                                                20. 731
                                                                          1. 00 17. 87
                                  396
                                             47. 310 -13. 161
               3043
                      N
                           ALA
       atom
                                                                          1.00 20.24
                                                                20. 349
                                  396
                                             48. 241 -14. 216
                           ALA
       atom
               3044
                      CA
                                                                20. 012
                                             47. 456 -15. 498
                                                                          1. 00 14. 04
               3045
                      CB
                           ALA
                                  396
       atom
                                  396
                                             49. 138 -13. 809
                                                                19. 158
                                                                          1. 00 21. 01
               3046
                      C
                           ALA
       atom
35
                                                                          1. 00 22. 33
                                                                19. 201
                                             50. 365 -13. 943
                      0
                           ALA
                                  396
       atom
               3047
```

```
48. 510 -13. 311
                                                              18. 100
                                                                       1.00 23.99
                          TRP
              3048
                     N
                                 397
      atom
                                           49. 211 -12. 899
                                                              16.895
                                                                       1. 00 24. 01
                         TRP
                                 397
              3049
                     CA
      atom
                         TRP
                                           48. 224 -12. 242
                                                              15. 910
                                                                       1. 00 26. 48
                     CB
                                 397
      atom
              3050
                                           48. 767 -12. 062
                                                              14. 503
                                                                       1. 00 21. 25
              3051
                     CG
                        TRP
                                 397
      atom
                                           48. 534 -12. 918
                                                              13. 380
                                                                       1. 00 18. 44
                     CD2 TRP
                                 397
              3052
 5
      atom
                     CE2 TRP
                                           49. 284 -12. 406
                                                              12. 295
                                                                       1. 00 21. 16
              3053
                                 397
      atom
                                                              13. 183
                                                                        1. 00 20. 72
                                            47. 767 -14. 068
              3054
                     CE3 TRP
                                 397
      atom
                                                              14.067
                                                                        1. 00 24. 22
                     CD1 TRP
                                 397
                                            49. 621 -11. 083
              3055
      atom
                                            49. 936 -11. 286
                                                              12. 739
                                                                        1.00 26.31
              3056
                     NE1 TRP
                                 397
      atom
                     CZ2 TRP
                                 397
                                            49. 289 -13. 010
                                                              11. 037
                                                                        1. 00 20. 85
              3057
10
      atom
                                                              11.924
                                                                        1.00 21.73
                                            47. 771 -14. 672
              3058
                     CZ3 TRP
                                 397
      atom
                                                                        1. 00 22. 07
                     CH2 TRP
                                 397
                                            48. 528 -14. 140
                                                              10.872
              3059
      atom
                                                              17. 192
                                                                        1. 00 26. 70
                                 397
                                            50. 347 -11. 933
              3060
                     C
                          TRP
      atom
                                                                        1. 00 28. 31
                                            51. 503 -12. 193
                                                              16.868
                          TRP
                                 397
              3061
                     0
      atom
                          GLU
                                 398
                                            50. 017 -10. 812
                                                              17. 811
                                                                        1. 00 26. 37
              3062
                     N
      atom
15
                                                              18. 112
                                                                        1. 00 27. 65
                          GLU
                                 398
                                            51. 020
                                                    -9. 806
              3063
                     CA
      atom
                                 398
                                            50. 315
                                                    -8. 560
                                                              18. 657
                                                                        1.00 28.99
                     CB
                          GLU
              3064
      atom
                                                     -7. 787
                                                              17. 567
                                                                        1.00 18.59
              3065
                     CG
                          GLU
                                 398
                                            49. 578
      atom
                                                     -7. 200
                                                              18.038
                                                                        1. 00 27. 32
                                 398
                                            48. 272
                     CD
                          GLU
      atom
              3066
                                 398
                                            47. 227
                                                     -7.608
                                                              17. 484
                                                                        1. 00 24. 97
                     OE1 GLU
              3067
20
      atom
                                                                        1. 00 22. 57
                                            48. 294 -6. 338
                                                              18. 953
      atom
              3068
                     OE2 GLU
                                 398
                                            52. 159 -10. 274
                                                              19. 032
                                                                        1. 00 30. 21
              3069
                     C
                          GLU
                                 398
      atom
              3070
                          GLU
                                 398
                                            53. 148 -9. 560
                                                              19. 213
                                                                        1. 00 31. 40
                     0
      atom
                                            52. 014 -11. 475
                                                               19. 599
                                                                        1. 00 31. 36
                          THR
                                 399
      atom
               3071
                     N
                                            53. 037 -12. 088
                                                              20. 452
                                                                        1.00 28.89
                     CA THR
                                 399
              3072
25
      atom
                                                               21.550
                                                                        1. 00 28. 74
               3073
                     CB
                          THR
                                 399
                                            52. 398 -12. 967
      atom
                                                                        1. 00 28. 05
                                            51. 402 -12. 216
                                                               22. 242
                     OG1 THR
                                 399
      atom
               3074
                                            53. 439 -13. 418
                                                               22. 545
                                                                        1. 00 27. 81
               3075
                     CG2 THR
                                 399
      atom
                                 399
                                            53. 919 -12. 988
                                                               19. 548
                                                                        1.00 29.90
               3076
                     C
                          THR
      atom
                                                                        1.00 21.09
                                                               19.803
                                 399
                                            55. 110 -13. 197
               3077
                          THR
30
      atom
                     0
                                 400
                                            53. 309 -13. 537
                                                               18. 500
                                                                        1.00 31.86
                          ALA.
               3078
                     N
      atom
                                                               17. 532
                                                                        1. 00 29. 44
               3079
                     CA
                          ALA
                                 400
                                            54. 027 -14. 377
      atom
                                                                        1. 00 24. 28
                                            53. 043 -15. 260
                                                               16. 751
                     CB
                          ALA
                                 400
      atom
               3080
                                                               16. 558
                                                                        1. 00 27. 37
               3081
                      C
                          ALA
                                 400
                                            54. 805 -13. 499
      atom
                                 400
                                            55. 970 -13. 745
                                                               16. 318
                                                                        1. 00 28. 03
               3082
                      0
                          ALA
      atom
35
                                                                        1. 00 30. 79
                                            54. 158 -12. 463
                                                               16. 021
                          ARG
                                 401
      atom
               3083
                     N
```

```
1.00 33.84
                                             54. 770 -11. 549
                                                                15.041
                                  401
              3084
                     CA
                          ARG
      atom
                                                                          1. 00 36. 55
                                             54. 055 -11. 686
                                                                13. 691
                          ARG
                                  401
              3085
                      CB
      atom
                                             54. 832 -11. 172
                                                                12. 471
                                                                          1. 00 42. 71
                          ARG
                                  401
              3086
                     CG
      atom
                                                                          1. 00 54. 18
                                             54. 461 -12. 002
                                                                11. 236
              3087
                      CD
                          ARG
                                  401
      atom
                                  401
                                             55. 092 -11. 549
                                                                  9. 991
                                                                          1. 00 62. 65
                          ARG
              3088
                      NE
 5
      atom
                                                                          1.00 63.48
                                             54. 437 -11. 329
                                                                  8.849
              3089
                      CZ
                          ARG
                                  401
      atom
                                                                          1.00 62.64
                                             53. 126 -11. 515
                                                                  8. 781
              3090
                      NH1 ARG
                                  401
      atom
                                                                          1.00 62.06
                                                                  7. 768
                                  401
                                             55. 093 -10. 928
              3091
                      NH2 ARG
      atom
                                                                 15. 451
                                                                          1. 00 35. 86
              3092
                      C
                           ARG
                                  401
                                             54. 734 -10. 078
      atom
                                                                          1. 00 36. 31
                                  401
                                             53. 655
                                                      -9. 508
                                                                 15. 650
              3093
                      0
                           ARG
10
      atom
                                                                 15. 550
                                                                          1. 00 36. 73
                                  402
                                             55. 908
                                                       -9.459
              3094
                           HIS
                      N
      atom
                                                                          1. 00 43. 53
                           HIS
                                  402
                                             55. 977
                                                       -8.055
                                                                 15. 929
               3095
                      CA
      atom
                                                                 15. 895
                                                                           1. 00 47. 85
                                  402
                                             57. 419
                                                       -7. 533
               3096
                      CB
                           HIS
      atom
                                                                 16. 332
                                                                           1. 00 54. 22
                                  402
                                                       -6.102
                          HIS
                                             57. 548
               3097
                      CG
      atom
                                                       -5. 456
                                                                           1. 00 57. 20
                      CD2 HIS
                                  402
                                             58. 535
                                                                 17. 001
               3098
15
      atom
                                                                 16.068
                                                                           1. 00 56. 15
               3099
                      ND1 HIS
                                  402
                                             56. 583
                                                       -5. 151
      atom
                                  402
                                             56.969
                                                       -3.984
                                                                 16. 552
                                                                           1. 00 56. 20
                      CE1 HIS
               3100
      atom
                                                                           1. 00 57. 51
                                                       -4.140
                                                                 17. 123
               3101
                      NE2 HIS
                                  402
                                             58. 151
      atom
                                                                           1.00 43.10
                                                                 15. 055
                                  402
                                              55. 103
                                                       -7.160
                           HIS
      atom
               3102
                      C
                                              55. 241
                                                       −7. 116
                                                                 13. 828
                                                                           1. 00 37. 82
                      0
                           HIS
                                  402
               3103
20
      atom
                                                                           1. 00 44. 21
                                                       -6.426
                                                                 15. 734
      atom
               3104
                      N
                           THR
                                  403
                                              54. 228
                                                       -5. 512
                                                                 15. 114
                                                                           1. 00 46. 78
               3105
                           THR
                                  403
                                              53. 286
                      CA
      atom
               3106
                      CB
                           THR
                                  403
                                              51.872
                                                       -5.967
                                                                 15. 444
                                                                           1. 00 47. 77
      atom
                                                                           1. 00 53. 44
                                              51. 724
                                                       -6.042
                                                                 16.865
                      OG1 THR
                                  403
      atom
               3107
                                                       -7.356
                                                                 14.879
                                                                           1.00 45.97
                      CG2 THR
                                  403
                                              51. 630
               3108
25
       atom
                                                       -4.099
                                                                 15. 655
                                                                           1. 00 47. 61
               3109
                      C
                           THR
                                   403
                                              53. 549
       atom
                                                                 16.855
                                                                           1. 00 48. 66
                                   403
                                                       -3.852
                                              53. 456
       atom
               3110
                      0
                           THR
                                                       -3.149
                                                                 14. 769
                                                                           1. 00 46. 68
               3111
                      N
                           PR<sub>0</sub>
                                   404
                                              53. 870
       atom
                                   404
                                              53. 955
                                                       -3.250
                                                                 13. 304
                                                                           1. 00 46. 25
               3112
                      CD
                           PR<sub>0</sub>
       atom
                                                                           1. 00 46. 27
                                                       -1.790
                                                                 15. 232
                                   404
                                              54. 147
               3113
                      CA
                           PR<sub>0</sub>
30
       atom
                                                                           1.00 45.29
                                                       -1.057
                                                                 13.961
                      CB
                           PR0
                                   404
                                              54. 578
               3114
       atom
                                                                           1.00 42.84
                                                       -1.812
                                                                 12. 871
               3115
                      CG
                           PR<sub>0</sub>
                                   404
                                              53. 928
       atom
                                                                 15. 923
                                                                           1. 00 45. 84
                                              52. 976
                                                       -1. 117
                            PR0
                                   404
       atom
               3116
                      C
                                                                 16. 919
                                                                           1. 00 50. 57
               3117
                            PR<sub>0</sub>
                                   404
                                              53. 160
                                                       -0. 411
       atom
                      0
                                              51.776
                                                        -1.312
                                                                 15. 384
                                                                           1. 00 42. 54
               3118
                      N
                            VAL
                                   405
       atom
35
                                                                           1. 00 38. 63
                                                       -0.724
                                                                 15. 981
                      CA
                            VAL
                                   405
                                              50. 579
       atom
               3119
```

```
14.966
                                                                        1. 00 37. 25
                                                      0.128
              3120
                     CB
                         VAL
                                 405
                                            49. 803
      atom
                                                               15. 507
                                                                        1. 00 35. 73
                                            48. 415
                                                      0.436
              3121
                     CG1 VAL
                                 405
      atom
                                                      1. 426
                                                               14. 696
                                                                        1. 00 40. 20
                     CG2 VAL
                                 405
                                            50. 569
              3122
      atom
                                                                        1. 00 35. 69
              3123
                     C
                          VAL
                                 405
                                            49. 700
                                                     -1.852
                                                               16. 487
      atom
                                                     -2. 352
                                                               15. 771
                                                                        1. 00 35. 97
                          VAL
                                 405
                                            48. 826
              3124
                     0
 5
      atom
                                                     -2.248
                                                               17. 733
                                                                        1.00 32.68
              3125
                     N
                          ASN
                                 406
                                            49. 941
      atom
                                                               18. 334
                                                                        1. 00 31. 20
              3126
                          ASN
                                 406
                                            49. 213
                                                     -3.352
      atom
                     CA
                                                     -3.941
                                                               19. 506
                                                                        1. 00 36. 47
                          ASN
                                 406
                                            50. 015
      atom
              3127
                     CB
                                                               20.668
                                                                        1. 00 35. 06
                     CG
                          ASN
                                 406
                                            50. 173
                                                     -2. 966
              3128
      atom
                                                     -2. 715
                                                               21. 130
                                                                        1. 00 41. 22
              3129
                     OD1 ASN
                                 406
                                            51. 285
10
      atom
                                                               21. 146
                                                                        1. 00 31. 42
                     ND2 ASN
                                 406
                                            49. 065
                                                     -2.424
              3130
      atom
                          ASN
                                            47.808
                                                     -3.032
                                                               18. 804
                                                                        1.00 29.41
                     C
                                 406
              3131
      atom
                                                               18. 785
                                                                        1. 00 26. 28
              3132
                          ASN
                                 406
                                            47. 365
                                                     -1. 882
      atom
                     0
                                                                        1. 00 27. 69
                                            47. 121
                                                     -4.081
                                                               19. 238
              3133
                          SER
                                 407
      atom
                     N
                                            45. 767
                                                     -3.967
                                                               19. 737
                                                                        1. 00 26. 15
              3134
                     CA
                          SER
                                 407
15
      atom
                          SER
                                 407
                                            44. 853
                                                     -4.921
                                                               18. 963
                                                                        1. 00 26. 19
              3135
                     CB
      atom
                                                               19. 273
                                                                        1.00 23.64
                          SER
                                            45. 168
                                                     -6.272
              3136
                     0G
                                 407
      atom
                                                               21. 226
                                                                         1.00 22.95
              3137
                     C
                          SER
                                 407
                                            45. 714
                                                     -4.314
      atom
                                                                         1.00 20.75
                                                               21. 955
                          SER
                                 407
                                            44. 863
                                                      -3.800
      atom
              3138
                     0
                                                     -5. 178
                                                               21. 675
                                                                         1. 00 21. 03
                          TRP
                                            46. 620
              3139
                     N
                                 408
20
      atom
                                                                         1. 00 21. 98
      atom
              3140
                     CA
                          TRP
                                 408
                                            46. 619
                                                     -5. 595
                                                               23. 075
                                                                         1. 00 24. 50
                     CB
                          TRP
                                 408
                                            47. 656
                                                     -6.716
                                                               23. 317
              3141
      atom
                          TRP
                                 408
                                            49. 082
                                                      -6. 282
                                                               23. 337
                                                                         1.00 34.03
              3142
                     CG
      atom
                                                               24. 453
                                                                         1. 00 38. 01
                     CD2 TRP
                                                      -5.745
      atom
              3143
                                 408
                                            49. 810
                     CE2 TRP
                                 408
                                            51. 112
                                                      -5. 440
                                                               23. 996
                                                                         1.00 40.00
              3144
25
      atom
                     CE3 TRP
                                 408
                                            49. 488
                                                      -5. 484
                                                               25. 793
                                                                         1. 00 40. 43
              3145
      atom
                                                               22. 286
                                                                         1. 00 39. 23
                                            49. 947
                                                      -6. 290
      atom
              3146
                     CD1 TRP
                                 408
                                                               22.670
                     NE1 TRP
                                 408
                                            51. 166
                                                     -5. 783
                                                                         1. 00 41. 55
              3147
      atom
                                            52.096
                                                      -4.890
                                                               24. 829
                                                                         1. 00 38. 74
              3148
                     CZ2 TRP
                                 408
      atom
                                                               26. 622
                                                                         1. 00 39. 17
                     CZ3 TRP
                                 408
                                            50. 468
                                                      -4. 935
30
      atom
              3149
                                                               26. 132
                                                                         1. 00 38. 81
                     CH2 TRP
                                 408
                                            51. 756
                                                      -4.644
              3150
      atom
              3151
                     C
                          TRP
                                 408
                                            46. 768
                                                      -4.475
                                                               24. 109
                                                                         1. 00 17. 96
      atom
                                                               25. 123
                                                                         1. 00 14. 08
                          TRP
                                            46. 078
                                                      -4. 492
      atom
              3152
                     0
                                 408
                          LEU
                                 409
                                            47. 641
                                                      -3.496
                                                               23. 867
                                                                         1. 00 18. 71
              3153
                     N
      atom
                                                               24.821
                                                                         1.00 20.06
               3154
                     CA
                          LEU
                                 409
                                            47. 797
                                                      -2.409
      atom
35
                                                                         1. 00 20. 61
                                            48. 926
                                                      -1. 444
                                                               24. 406
               3155
                     CB
                          LEU
                                 409
      atom
```

```
1. 00 18. 35
                                                               25. 474
                     CG LEU
                                                     -0. 424
              3156
                                 409
                                            49. 414
      atom
                                                     -0.708
                                                               26. 837
                                                                         1. 00 5. 22
                     CD1 LEU
                                 409
                                            48. 825
              3157
      atom
                                                     -0.481
                                                               25. 586
                                                                         1. 00 23. 57
                     CD2 LEU
                                 409
                                            50. 919
      atom
              3158
                                                               24. 944
                                                                         1. 00 22. 79
      atom
              3159
                     C
                          LEU
                                 409
                                            46. 474
                                                     -1.656
                                            46.007
                                                     -1.364
                                                               26. 053
                                                                        1. 00 29. 34
                          LEU
                                 409
              3160
                     0
 5
      atom
                          GLY
                                            45. 878
                                                     -1.348
                                                               23. 798
                                                                         1.00 25.51
              3161
                     N
                                 410
      atom
                                                               23. 766
                                                                         1. 00 17. 80
              3162
                          GLY
                                 410
                                            44. 605
                                                     -0.645
      atom
                     CA
                                                                         1. 00 17. 47
                                            43. 507
                                                     -1.458
                                                               24. 420
                     C
                          GLY
                                 410
      atom
              3163
                                                                         1. 00 20. 34
              3164
                     0
                          GLY
                                 410
                                            42. 665
                                                     -0.911
                                                               25. 130
      atom
                          ASN
                                            43. 495
                                                     -2. 767
                                                               24. 201
                                                                         1. 00 14. 98
      atom
              3165
                     N
                                 411
10
                                                               24.810
                                            42. 454
                                                     -3.585
                                                                         1. 00 19. 92
                          ASN
                                 411
              3166
                     CA
      atom
                          ASN
                                            42. 508
                                                     -5.018
                                                               24. 266
                                                                         1.00 21.16
              3167
                     CB
                                 411
      atom
                                                     -5. 177
                                                               22. 990
                                                                         1. 00 26. 01
              3168
                     CG
                          ASN
                                 411
                                            41. 692
      atom
                                                               22. 865
                                                                         1. 00 21. 55
                     OD1 ASN
                                            40. 599
                                                     -4. 618
              3169
                                 411
      atom
                     ND2 ASN
                                            42. 227
                                                     -5. 928
                                                               22. 029
                                                                         1. 00 26. 80
              3170
                                 411
15
      atom
                                                                         1. 00 23. 12
                          ASN
                                 411
                                            42. 598
                                                     -3. 557
                                                               26. 339
      atom
              3171
                     C
                                                     -3.374
                                                               27. 062
                                                                         1. 00 24. 27
                     0
                          ASN
                                 411
                                            41. 613
              3172
      atom
                                                               26.828
                                                                         1. 00 23. 33
              3173
                     N
                          ILE
                                 412
                                            43. 828
                                                     -3.712
      atom
                                                                         1.00 24.19
                                 412
                                            44.063
                                                     -3.656
                                                               28. 259
                          ILE
      atom
              3174
                     CA
                                                     -3.726
                                                               28. 603
                                                                         1. 00 23. 03
                     CB
                          ILE
                                 412
                                            45. 569
              3175
20
      atom
                                                                         1. 00 15. 90
      atom
              3176
                     CG2 ILE
                                 412
                                            45. 826
                                                     -3.053
                                                               29. 955
                                                               28. 659
                                                                         1. 00 18. 08
              3177
                     CG1 ILE
                                 412
                                            46. 035
                                                     -5. 182
      atom
              3178
                     CD1 ILE
                                 412
                                            47. 533
                                                     -5.304
                                                               28. 729
                                                                         1. 00 18. 86
      atom
                                                     -2.306
                                                               28. 732
                                                                         1. 00 27. 08
                                 412
                                            43. 518
      atom
              3179
                     C
                          ILE
                                                               29. 627
                                                                         1. 00 26. 35
                                 412
                                            42.661
                                                     -2.239
              3180
                     0
                          ILE
      atom
25
                                                                         1.00 23.29
              3181
                     N
                          ILE
                                 413
                                            44. 013
                                                      -1.235
                                                               28. 113
      atom
                                                       0.109
                                                               28. 474
                                                                         1. 00 24. 70
                          ILE
                                 413
                                            43. 589
      atom
               3182
                     CA
                                                                         1. 00 23. 52
              3183
                     CB
                          ILE
                                 413
                                            44. 176
                                                       1. 146
                                                               27. 508
      atom
                                            43. 518
                                                       2. 492
                                                               27. 738
                                                                         1. 00 22. 97
              3184
                     CG2 ILE
                                  413
      atom
                                                               27. 684
                                                                         1.00 18.99
                                            45. 694
                                                       1. 227
               3185
                     CG1 ILE
                                 413
30
      atom
                                                       2.585
                                                               28. 110
                                                                         1.00 16.43
               3186
                     CD1 ILE
                                 413
                                            46. 187
      atom
                                                       0.270
                                                               28. 478
                                                                         1. 00 28. 54
               3187
                     C
                          ILE
                                 413
                                            42. 067
      atom
                                                       0. 546
                                                               29. 509
                                                                         1. 00 28. 45
                                  413
                                            41. 460
      atom
               3188
                     0
                          ILE
                                                       0.086
                                                                         1. 00 28. 25
               3189
                     N
                          MET
                                 414
                                            41. 452
                                                               27. 319
      atom
                                            40. 015
                                                       0. 253
                                                               27. 203
                                                                         1. 00 29. 19
               3190
                      CA
                          MET
                                  414
35
      atom
                                                       0. 219
                                                               25. 728
                                                                         1. 00 32. 24
                      CB
                          MET
                                  414
                                            39. 604
      atom
               3191
```

	atom	3192	CG	MET	414	40. 255	1. 305	24. 859	1. 00 34. 56
	atom	3193	SD	MET	414	39. 867	2. 994	25. 373	1. 00 39. 45
	atom	3194	CE	MET	414	38. 086	3. 098	24. 803	1. 00 32. 14
	atom	3195	C	MET	414	39. 187	-0. 757	27. 972	1. 00 27. 51
5	atom	3196	0	MET	414	38. 041	-0. 487	28. 318	1. 00 23. 15
	atom	3197	N	TYR	415	39. 758	-1. 917	28. 263	1. 00 25. 08
	atom	3198	CA	TYR	415	38. 982	-2. 922	28. 955	1. 00 20. 32
	atom	3199	CB	TYR	415	38. 725	-4. 072	27. 992	1. 00 24. 28
	atom	3200	CG	TYR	415	37. 789	-3. 703	26. 859	1. 00 25. 64
10	atom	3201	CD1	TYR	415	38. 232	-3. 672	25. 534	1. 00 29. 56
	atom	3202	CE1	TYR	415	37. 361	-3. 339	24. 487	1. 00 27. 98
	atom	3203	CD2	TYR	415	36. 462	-3. 393	27. 111	1. 00 18. 42
	atom	3204	CE2	TYR	415	35. 593	-3. 063	26. 090	1. 00 26. 13
	atom	3205	CZ	TYR	415	36. 044	-3. 036	24. 781	1. 00 29. 85
15	atom	3206	OH	TYR	415	35. 174	-2. 681	23. 781	1. 00 36. 03
	atom	3207	С	TYR	415	39. 593	-3. 430	30. 254	1. 00 21. 46
	atom	3208	0	TYR	415	39. 341	-4. 565	30. 658	1. 00 25. 89
	atom	3209	N	ALA	416	40. 352	-2. 571	30. 928	1. 00 15. 41
	atom	3210	CA	ALA	416	41. 025	-2. 928	32. 166	1. 00 15. 54
20	atom	3211	CB	ALA	416	41. 809	-1. 707	32. 723	1. 00 11. 41
	atom	3212	C	ALA	416	40. 135	-3. 493	33. 264	1. 00 15. 02
	atom	3213	0	ALA	416	40. 489	-4. 460	33. 928	1. 00 19. 20
	atom	3214	N	PRO	417	38. 939	-2. 947	33. 425	1. 00 15. 08
	atom	3215	CD	PR0	417	38. 235	-1. 912	32. 652	1. 00 12. 21
25	atom	3216	CA	PRO	417	38. 135	-3. 507	34. 508	1. 00 13. 68
	atom	3217	CB	PR0	417	36. 989	-2. 508	34. 674	1. 00 18. 98
	atom	3218	CG	PR0	417	37. 110	-1. 512	33. 544	1. 00 14. 83
	atom	3219	C	PR0	417	37. 627	-4. 915	34. 303	1. 00 19. 04
	atom	3220	0	PR0	417	37. 314	-5. 597	35. 268	1. 00 18. 22
3 0	atom	3221	N	THR	418	37. 546	-5. 373	33. 059	1. 00 20. 00
	atom	3222	CA	THR	418	37. 007	-6. 709	32. 851	1. 00 20. 89
	atom	3223	CB	THR	418	36. 708	−7. 032	31. 360	1. 00 18. 03
	atom	3224	0G1	THR	418	37. 937	−7. 202	30. 657	1. 00 23. 26
	atom	3225	CG2	THR	418	35. 899	-5. 922	30. 713	1. 00 19. 85
3 5	atom	3226	C	THR	418	37. 886	-7. 812	33. 389	1. 00 19. 47
	atom	3227	0	THR	418	39. 036	−7. 597	33. 759	1. 00 21. 87

	atom	3228	N	LEU	419	37. 305 -9. 001	33. 388	1. 00 18. 19
	atom	3229	CA	LEU	419	37. 917 -10. 204	33. 863	1. 00 17. 41
	atom	3230	СВ	LEU	419	36. 788 -11. 115	34. 280	100 17. 35
	atom	3231	CG	LEU	419	36. 701 -12. 615	34. 162	1. 00 17. 06
5	atom	3232	CD1	LEU	419	37. 430 -13. 251	35. 320	1. 00 15. 19
	atom	3233	CD2	LEU	419	35. 206 -13. 000	34. 168	1. 00, 2. 59
	atom	3234	С	LEU	419	38. 863 -10. 856	32. 854	1. 00 21. 73
	atom	3235	0	LEU	419	39. 865 -11. 452	33. 246	1. 00 25. 73
	atom	3236	N	TRP	420	38. 586 -10. 727	31. 559	1. 00 19. 46
10	atom	3237	CA	TRP	420	39. 486 -11. 317	30. 572	1. 00 15. 85
	atom	3238	CB	TRP	420	38. 828 -11. 420	29. 185	1. 00 17. 26
	atom	3239	CG	TRP	420	38. 072 -10. 210	28. 695	1. 00 16. 89
	atom	3240	CD2	TRP	420	38. 525 -9. 232	27. 738	1. 00 20. 44
	atom	3241	CE2	TRP	420	37. 459 -8. 323	27. 530	1. 00 17. 05
15	atom	3242	CE3	TRP	420	39. 724 -9. 039	27. 033	1. 00 15. 89
	atom	3243	CD1	TRP	420	36. 790 -9. 859	29. 015	1. 00 18. 15
	atom	3244	NE1	TRP	420	36. 416 -8. 727	28. 321	1. 00 17. 75
	atom	3245	CZ2	TRP	420	37. 559 -7. 234	26. 655	1. 00 21. 08
	atom	3246	CZ3	TRP	420	39. 817 -7. 957	26. 157	1. 00 18. 36
20	atom	3247	CH2	TRP	420	38. 741 −7. 070	25. 975	1. 00 14. 83
	atom	3248	C	TRP	420	40. 773 -10. 517	30. 460	1. 00 20. 31
	atom	3249	0	TRP	420	41. 873 -11. 087	30. 443	1. 00 21. 36
	atom	3250	N	ALA	421	40. 645 -9. 192	30. 395	1. 00 18. 99
	atom	3251	CA	ALA	421	41. 820 -8. 323	30. 278	1. 00 19. 53
25	atom	3252	CB	ALA	421	41. 381 -6. 885	30. 005	1. 00 14. 34
	atom	3253	С	ALA	421	42. 723 -8. 365	31. 510	1. 00 22. 41
	atom	3254	0	ALA	421	43. 950 -8. 434	31. 397	1. 00 22. 08
	atom	3255	N	ARG	422	42. 103 -8. 320	32. 685	1. 00 25. 03
	atom	3256	CA	ARG	422	42. 836 -8. 340	33. 945	1. 00 25. 45
3 0	atom	3257	CB	ARG	422	41. 871 -8. 167	35. 132	1. 00 22. 24
	atom	3258	CG	ARG	422	41. 631 -6. 722	35. 541	1. 00 26. 34
	atom	3259	CD	ARG	422	40. 429 -6. 583	36. 472	1. 00 25. 25
	atom	3260	NE	ARG	422	40. 825 -6. 700	37. 880	1. 00 31. 26
	atom	3261	CZ	ARG	422	40. 010 -7. 084	38. 859	1. 00 26. 82
3 5	atom	3262	NH1		422	38. 748 −7. 390	38. 585	1. 00 25. 53
	atom	3263	NH2	ARG	422	40. 458 -7. 149	40. 107	1. 00 28. 34

```
1.00 25.74
                                                               34. 129
                                                    -9. 635
                                 422
                                            43. 612
              3264
                     C
                          ARG
      atom
                                                               34. 302
                                                                        1. 00 24. 21
                                 422
                                            44. 832
                                                    -9. 624
              3265
                          ARG
                     0
      atom
                                                                        1.00 25.90
                                 423
                                            42. 893 -10. 751
                                                               34. 070
              3266
                     N
                          MET
      atom
                                                               34. 287
                                                                        1. 00 23. 33
                                            43. 493 -12. 046
      atom
              3267
                     CA
                          MET
                                 423
                                                                        1. 00 22. 80
                                 423
                                            42. 416 -13. 048
                                                               34. 692
              3268
                     CB
                          MET
 5
      atom
                                                                        1. 00 17. 76
                                 423
                                            41. 858 -12. 787
                                                               36. 097
              3269
                     CG
                          MET
      atom
                                                               36. 473
                                                                        1. 00 26. 13
                                            40. 368 -13. 726
              3270
                     SD
                          MET
                                 423
      atom
                                                                        1. 00 29. 78
                                            41. 069 -15. 281
                                                               36. 925
                                 423
              3271
                     CE
                          MET
      atom
                                                                        1.00 27.38
                                 423
                                            44. 296 -12. 585
                                                               33. 131
              3272
                     C
                          MET
      atom
                                                                        1. 00 32. 41
                                 423
                                            45. 426 -13. 025
                                                               33. 318
      atom
              3273
                     0
                          MET
10
                                                               31. 932
                                                                        1.00 28.00
                                 424
                                            43. 738 -12. 548
              3274
                     N
                          ILE
      atom
                                                               30.796
                                                                        1. 00 28. 12
              3275
                          ILE
                                 424
                                            44. 464 -13. 078
                     CA
      atom
                                                                        1.00 29.39
                                                               29.690
                                 424
                                            43. 499 -13. 585
              3276
                     CB
                          ILE
      atom
                                                               28. 733
                                                                        1.00 32.06
                                 424
                                            44. 250 -14. 508
                     CG2 ILE
              3277
      atom
              3278
                                                                         1. 00 27. 61
                     CG1 ILE
                                 424
                                            42. 316 -14. 325
                                                               30. 315
      atom
15
                                                                         1. 00 26. 72
                                            41. 834 -15. 508
                                                               29. 508
              3279
                     CD1 ILE
                                 424
      atom
                     C
                                 424
                                            45. 456 -12. 105
                                                               30. 170
                                                                         1. 00 26. 23
              3280
                          ILE
      atom
                                                                         1.00 21.98
                                            46. 645 -12. 374
                                                               30. 126
              3281
                     0
                          ILE
                                 424
      atom
                                                                         1.00 26.96
                                            44. 973 -10. 969
                                                               29. 694
                                 425
              3282
                     N
                          LEU
      atom
                                 425
                                            45. 856 -10. 022
                                                               29. 046
                                                                         1. 00 23. 05
                     CA
                          LEU
              3283
20
      atom
                                                                         1. 00 23. 77
                                 425
                                            45. 034 -8. 867
                                                               28. 472
      atom
               3284
                     CB
                          LEU
                                                               26. 943
                                                                         1. 00 21. 55
                                 425
                                            44. 802 -8. 870
              3285
                     CG
                          LEU
      atom
                                                                         1. 00 21. 92
               3286
                     CD1 LEU
                                 425
                                            44. 583 -10. 282
                                                               26. 377
      atom
                                                               26.653
                                                                         1. 00 17. 53
                                 425
                                            43. 602
                                                      -7. 999
               3287
                      CD2 LEU
      atom
                                            46. 998
                                                      -9.519
                                                               29. 926
                                                                         1.00 26.70
               3288
                     C
                          LEU
                                 425
      atom
25
                                                                         1.00 30.65
                                                      -9.950
                                                               29. 742
               3289
                     0
                          LEU
                                 425
                                            48. 140
      atom
                                                               30. 884
                                                                         1. 00 24. 60
                                 426
                                            46. 713
                                                      -8. 636
               3290
                          MET
      atom
                      N
                                  426
                                                      -8.101
                                                               31. 771
                                                                         1. 00 19. 17
               3291
                      CA
                          MET
                                            47. 761
      atom
                                                                         1. 00 17. 82
                                  426
                                            47. 148
                                                      -7.514
                                                                33. 049
      atom
               3292
                      CB
                          MET
                                                                32. 881
                                                                         1. 00 24. 33
                                                      -6. 141
               3293
                                  426
                                             46. 479
                      CG
                          MET
30
       atom
                                                                         1.00 22.16
                      SD
                                  426
                                             45. 521
                                                      -5.688
                                                                34. 357
               3294
                          MET
      atom
                                                                33. 628
                                                                         1. 00 23. 93
                                             44. 029
                                                      -4.983
               3295
                      CE
                          MET
                                  426
       atom
                                                                32. 188
                                                                         1. 00 19. 10
                                             48. 777
                                                      -9.165
               3296
                      C
                           MET
                                  426
       atom
                                             49. 989
                                                     -8. 979
                                                                32. 054
                                                                         1. 00 12. 33
               3297
                      0
                           MET
                                  426
       atom
                                  427
                                                                         1. 00 18. 78
                                             48. 267 -10. 281
                                                                32. 700
               3298
                      N
                           THR
       atom
35
                                                                         1.00 21.30
                                                                33. 182
                                  427
                                             49. 125 -11. 352
               3299
                      CA
                           THR
       atom
```

```
1.00 20.56
              3300
                     CB
                          THR
                                 427
                                            48. 283 -12. 569
                                                               33. 636
      atom
                                            47. 293 -12. 125
                                                               34. 571
                                                                        1. 00 21. 39
                     OG1 THR
                                 427
      atom
              3301
                                            49. 155 -13. 620
                                                               34. 317
                                                                        1. 00 18. 69
              3302
                     CG2 THR
                                 427
      atom
              3303
                     C
                          THR
                                 427
                                            50. 149 -11. 783
                                                               32. 149
                                                                        1. 00 25. 61
      atom
                                                                        1.00 23.48
                          THR
                                            51. 348 -11. 796
                                                               32. 435
                                 427
      atom
              3304
                     0
 5
                                                               30. 934
                                                                        1.00 29.58
                          HIS
                                 428
                                            49. 671 -12. 071
              3305
                     N
      atom
                         HIS
                                 428
                                            50. 514 -12. 543
                                                               29. 834
                                                                        1. 00 25. 46
              3306
                     CA
      atom
                                                               28. 688
                                                                        1. 00 25. 48
                          HIS
                                 428
                                            49. 628 -13. 067
      atom
              3307
                     CB
                         HIS
                                 428
                                            50. 383 -13. 412
                                                               27. 438
                                                                        1. 00 28. 07
              3308
                     CG
      atom
                                                               26.893
                                                                        1. 00 26. 29
                     CD2 HIS
                                 428
                                            50. 706 -14. 609
      atom
              3309
10
                                                                        1.00 32.13
                     ND1 HIS
                                            50. 920 -12. 456
                                                               26. 599
                                 428
      atom
              3310
                                                               25. 595
                                                                        1. 00 28. 43
                     CE1 HIS
                                 428
                                            51. 541 -13. 049
              3311
      atom
                                                                        1. 00 27. 25
                     NE2 HIS
                                 428
                                            51. 425 -14. 355
                                                               25. 750
              3312
      atom
                                                               29. 270
                                                                        1. 00 23. 01
                     C
                          HIS
                                 428
                                            51. 553 -11. 574
      atom
              3313
                                                               29. 011
                                                                        1. 00 24. 23
              3314
                     0
                          HIS
                                 428
                                            52. 687 -11. 962
      atom
15
                                            51. 192 -10. 318
                                                               29. 086
                                                                        1. 00 21. 06
              3315
                     N
                          PHE
                                 429
      atom
                                                                        1.00 22.48
                          PHE
                                            52. 150
                                                    -9. 404
                                                               28. 496
                                 429
              3316
                     CA
      atom
                          PHE
                                 429
                                            51. 430
                                                     -8. 262
                                                               27. 773
                                                                        1. 00 25. 70
              3317
                     CB
      atom
                                                                        1. 00 28. 92
                                                     -8. 633
                                                               26. 394
              3318
                     CG
                          PHE
                                 429
                                            50. 958
      atom
                     CD1 PHE
                                                     -9. 146
                                                               26. 200
                                                                        1. 00 26. 69
                                 429
                                            49. 682
20
      atom
              3319
              3320
                     CD2 PHE
                                 429
                                            51. 804
                                                     -8. 501
                                                               25. 291
                                                                        1. 00 27. 61
      atom
                     CE1 PHE
                                  429
                                            49. 252
                                                     -9.529
                                                               24. 932
                                                                        1. 00 31. 49
              3321
      atom
                     CE2 PHE
                                            51. 380
                                                     -8. 883
                                                               24. 017
                                                                        1.00 27.65
              3322
                                 429
      atom
                                                     -9.398
                                                               23. 835
                                                                        1.00 26.84
              3323
                     CZ
                          PHE
                                  429
                                            50. 105
      atom
                                                               29. 492
                                                                        1. 00 20. 77
                                  429
                                            53. 137
                                                     -8.872
              3324
                     C
                          PHE
25
      atom
                                                     -8. 563
                                                               29. 139
                                                                        1. 00 21. 91
              3325
                     0
                          PHE
                                  429
                                            54. 265
      atom
                                                     -8. 751
                                                               30. 745
                                                                        1. 00 22. 30
      atom
              3326
                     N
                          PHE
                                  430
                                            52. 733
                          PHE
                                  430
                                            53. 700
                                                     -8. 286
                                                               31. 726
                                                                        1. 00 22. 59
              3327
      atom
                     CA
              3328
                          PHE
                                  430
                                            53. 033
                                                      -7. 977
                                                               33. 072
                                                                         1. 00 24. 91
      atom
                     CB
                                                               33. 259
                                                                         1.00 26.03
                          PHE
                                            52. 774
                                                     -6. 514
      atom
              3329
                     CG
                                  430
30
                                                     -5.939
                                                               32. 762
                                                                         1. 00 30. 68
              3330
                     CD1 PHE
                                  430
                                            51. 602
      atom
                     CD2 PHE
                                            53. 749
                                                     -5. 686
                                                               33. 811
                                                                         1. 00 20. 79
              3331
                                  430
      atom
                                                     -4. 553
                                                               32. 802
                                                                         1. 00 28. 98
      atom
              3332
                     CE1 PHE
                                  430
                                            51. 415
                     CE2 PHE
                                  430
                                            53. 572
                                                      -4. 323
                                                               33. 855
                                                                        1. 00 21. 47
              3333
      atom
                      CZ
                          PHE
                                  430
                                            52. 405
                                                      -3.747
                                                               33. 348
                                                                         1. 00 22. 42
              3334
35
      atom
                                                      -9.330
                                                               31. 867
                                                                         1. 00 13. 18
               3335
                      C
                          PHE
                                  430
                                            54. 799
      atom
```

	- 4	2226	Λ	DUE	430	55. 966 -8. 994	31. 865	1. 00 12. 59
	atom	3336	0	PHE		54. 435 -10. 596	31. 928	1. 00 12. 33
	atom	3337	N	SER	431			1. 00 11. 30
	atom	3338	CA	SER	431	55. 455 ~11. 637	32. 033	1. 00 20. 34
	atom	3339	CB	SER	431	54. 813 -13. 002	32. 226	
5	atom	3340	OG	SER	431	55. 091 -13. 821	31. 115	1. 00 30. 81
	atom	3341	C	SER	431	56. 344 -11. 684	30. 794	1. 00 23. 41
	atom	3342	0	SER	431	57. 555 -11. 847	30. 903	1. 00 22. 98
	atom	3343	N	ILE	432	55. 732 -11. 548	29. 617	1. 00 26. 02
	atom	3344	CA	ILE	432	56. 470 -11. 565	28. 354	1. 00 24. 15
10	atom	3345	CB	ILE	432	55. 507 −11. 580	27. 130	1. 00 29. 47
	atom	3346	CG2	ILE	432	56. 290 −11. 349	25. 834	1. 00 26. 68
	atom	3347	CG1	ILE	432	54. 737 −12. 905	27. 079	1. 00 23. 71
	atom	3348	CD1	ILE	432	55. 608 <i>-</i> 14. 126	26. 962	1. 00 28. 14
	atom	3349	C	ILE	432	57. 348 -10. 329	28. 264	1. 00 23. 16
15	atom	3350	0	ILE	432	58. 558 −10. 426	28. 106	1. 00 23. 35
	atom	3351	N	LEU	433	56. 724 − 9. 164	28. 371	1. 00 23. 94
	atom	3352	CA	LEU	433	57. 435 −7. 894	28. 309	1. 00 28. 88
	atom	3353	CB	LEU	433	56. 441 −6. 747	28. 501	1. 00 30. 58
	atom	3354	CG	LEU	433	56. 346 − 5. 678	27. 407	1. 00 33. 37
2 0	atom	3355	CD1	LEU	433	56. 205 - 6. 322	26. 028	1. 00 32. 23
	atom	3356	CD2	LEU	433	55. 145 <i>-</i> 4. 785	27. 718	1. 00 36. 50
	atom	3357	C	LEU	433	58. 553 -7. 817	29. 363	1. 00 31. 43
	atom	3358	0	LEU	433	59. 625 <i>-</i> 7. 268	29. 121	1. 00 31. 96
	atom	3359	N	LEU	434	58. 284 -8 . 367	30. 540	1. 00 34. 05
25	atom	3360	CA	LEU	434	59. 254 <i>-</i> 8. 402	31. 629	1. 00 32. 03
	atom	3361	CB	LEU	434	58. 606 -9. 059	32. 855	1. 00 33. 37
	atom	3362	CG	LEU	434	59. 129 -8. 941	34. 288	1. 00 31. 50
	atom	3363	CD1	LEU	434	59. 629 <i>-</i> 7. 550	34. 594	1. 00 34. 29
	atom	3364	CD2	LEU	434	57. 989 -9. 282	35. 220	1. 00 34. 33
3 0	atom	3365	С	LEU	434	60. 470 -9. 231	31. 203	1. 00 30. 59
	atom	3366	0	LEU	434	61. 612 -8. 795	31. 326	1. 00 30. 54
	atom	3367	N	ALA	435	60. 200 -10. 429	30. 696	1. 00 28. 04
	atom	3368	CA	ALA	435	61. 236 -11. 357	30. 283	1. 00 27. 70
	atom	3369	СВ	ALA	435	60. 606 -12. 560	29. 606	1. 00 23. 29
3 5	atom	3370	C	ALA	435	62. 303 -10. 759	29. 389	1. 00 31. 48
	atom	3371	0	ALA	435	63. 493 -10. 976	29. 618	1. 00 37. 97

	atom	3372	N	GLN	436	61. 890	-10. 007	28. 379	1. 00 33. 13
	atom	3373	CA	GLN	436	62. 827	-9. 398	27. 444	1. 00 34. 38
	atom	3374	CB	GLN	436	62. 195	-9. 358	26. 051	1. 00 33. 83
	atom	3375	CG	GLN	436	61. 279	-10. 536	25. 748	1. 00 36. 51
5	atom	3376	CD	GLN	436	60. 003	-10. 132	25. 018	1. 00 42. 61
	atom	3377	0E1	GLN	436	59. 401	−9 . 102	25. 321	1. 00 44. 59
	atom	3378	NE2	GLN	436	59. 585	-10. 948	24. 051	1. 00 42. 60
	atom	3379	C	GLN	436	63. 300	-7. 991	27. 832	1. 00 35. 80
	atom	3380	0	GLN	436	63. 988	-7. 329	27. 065	1. 00 34. 86
10	atom	3381	N	GLU	437	62. 953	-7. 537	29. 028	1. 00 39. 49
	atom	3382	CA	GLU	437	63. 343	-6. 191	29. 471	1. 00 45. 63
	atom	3383	CB	GLU	437	64. 878	-6. 048	29. 504	1. 00 47. 97
	atom	3384	CG	GLU	437	65. 637	-7. 268	30. 035	1. 00 51. 93
	atom	3385	CD	GLU	437	65. 701	-7. 312	31. 563	1. 00 56. 66
15	atom	3386	0E1	GLU	437	65. 318	-6. 303	32. 208	1. 00 56. 30
	atom	3387	0E2	GLU	437	66. 128	-8. 355	32. 117	1. 00 50. 71
	atom	3388	C	GLU	437	62. 733	-5. 103	28. 553	1. 00 45. 05
	atom	3389	0	GLU	437	63. 433	−4 . 196	28. 096	1. 00 40. 40
	atom	3390	N	GLN	438	61. 422	-5. 206	28. 316	1. 00 44. 81
20	atom	3391	CA	GLN	438	60. 671	-4. 273	27. 467	1. 00 44. 57
	atom	3392	CB	GLN	438	59. 854	-5. 054	26. 427	1. 00 43. 31
	atom	3393	CG	GLN	438	60. 666	-5. 719	25. 329	1. 00 41. 52
	atom	3394	CD	GLN	438	61. 618	-4. 766	24. 653	1. 00 39. 73
	atom	3395	0E1	GLN	438	61. 417	-3. 560	24. 682	1. 00 39. 88
25	atom	3396	NE2	GLN	438	62. 669	-5. 304	24. 040	1. 00 40. 97
	atom	3397	С	GLN	438	59. 709	-3. 302	28. 191	1. 00 44. 17
	atom	3398	0	GLN	438	59. 284	-2. 309	27. 600	1. 00 47. 18
	atom	3399	N	LEU	439	59. 358	-3. 591	29. 443	1. 00 39. 41
	atom	3400	CA	LEU	439	58. 437	−2. 757	30. 234	1. 00 35. 63
3 0	atom	3401	CB	LEU	439	58. 619	-3. 047	31. 725	1. 00 36. 65
	atom	3402	CG	LEU	439	57. 675	-3. 977	32. 484	1. 00 35. 38
	atom	3403	-	LEU	439	56. 661	-4. 630	31. 580	1. 00 37. 24
	atom	3404		LEU	439	58. 520	-5. 014	33. 152	1. 00 35. 93
	atom	3405	С	LEU	439	58. 533	-1. 240	30. 046	1. 00 34. 88
3 5	atom	3406	0	LEU	439	57. 513	-0. 533	30. 050	1. 00 31. 04
	atom	3407	N	GLU	440	59. 752	-0. 732	29. 900	1. 00 31. 23

	atom	3408	CA	GLU	440	59. 929	0. 700	29. 749	1. 00 34. 08
	atom	3409	CB	GLU	440	61. 203	1. 137	30. 471	1. 00 36. 60
	atom	3410	CG	GLU	440	61. 344	0.546	31. 869	1. 00 46. 25
	atom	3411	CD	GLU	440	62. 326	-0. 619	31. 917	1. 00 51. 65
5	atom	3412	0E1	GLU	440	62. 004	-1. 705	31. 381	1. 00 55. 45
	atom	3413	0E2	GLU	440	63. 425	-0. 451	32. 489	1. 00 56. 28
	atom	3414	C	GLU	440	59. 933	1. 195	28. 297	1. 00 33. 24
	atom	3415	0	GLU	440	60. 157	2. 383	28. 047	1. 00 32. 66
	atom	3416	N	LYS	441	59. 674	0. 288	27. 357	1. 00 29. 40
10	atom	3417	CA	LYS	441	59. 625	0. 618	25. 933	1. 00 32. 91
	atom	3418	CB	LYS	441	60. 021	-0. 616	25. 097	1. 00 35. 80
	atom	3419	CG	LYŞ	441	59. 636	-0. 582	23. 593	1. 00 44. 21
	atom	3420	CD	LYS	441	59. 066	-1. 942	23. 090	1. 00 43. 76
	atom	3421	CE	LYS	441	59. 752	-2. 436	21. 800	1. 00 42. 14
15	atom	3422	NZ	LYS	441	59. 679	-3. 931	21. 557	1. 00 32. 91
	atom	3423	C	LYS	441	58. 202	1. 057	25. 586	1. 00 32. 30
	atom	3424	0	LYS	441	57. 277	0. 247	25. 575	1. 00 34. 79
	atom	3425	N	ALA	442	58. 011	2. 341	25. 328	1. 00 32. 09
	atom	3426	CA	ALA	442	56. 679	2. 814	24. 988	1. 00 34. 73
2 0	atom	3427	CB	ALA	442	56. 654	4. 321	24. 923	1. 00 34. 99
	atom	3428	C	ALA	442	56. 272	2. 233	23. 646	1. 00 35. 06
	atom	3429	0	ALA	442	57. 004	2. 353	22. 667	1. 00 34. 73
	atom	3430	N	LEU ·	443	55. 107	1. 597	23. 612	1. 00 34. 80
	atom	3431	CA	LEU	443	54. 583	1. 006	22. 388	1. 00 32. 57
2 5	atom	3432	CB	LEU	443	54. 064	-0. 403	22. 665	1. 00 32. 82
	atom	3433		LEU	443	54. 984	-1. 291	23. 493	1. 00 31. 23
		3434		LEU	443		-2. 002		
	atom		CD2		443		-2. 279		1. 00 27. 43
	atom	3436		LEU	443		1. 873		1. 00 33. 71
3 0	atom	3437		LEU	443	52. 839		22. 602	1. 00 32. 92
	atom	3438	N	ASP	444	53. 166			1. 00 34. 97
	atom	3439	CA	ASP	444	52. 098		19. 940	1. 00 34. 69
	atom	3440	CB	ASP	444	52. 472		18. 505	1. 00 35. 84
	atom	3441	CG	ASP	444	53. 339		18. 421	1. 00 40. 11
3 5		3442		ASP	444	53. 370		19. 394	1. 00 47. 24
	atom	3443	OD2	ASP	444	53. 996	4. 295	17. 382	1. 00 43. 96

	atom	3444	C	ASP	444	50. 868	1. 635	19. 921	1. 00 36. 94
	atom	3445	0	ASP	444	50. 976	0. 412	19. 918	1. 00 42. 96
	atom	3446	N	CYS	445	49. 700	2. 255	19. 911	1. 00 35. 62
	atom	3447	CA	CYS	445	48. 446	1. 530	19. 876	1. 00 32. 06
5	atom	3448	CB	CYS	445	48. 165	0. 899	21. 244	1. 00 31. 49
	atom	3449	SG	CYS	445	47. 942	2. 070	22. 618	1. 00 32. 37
	atom	3450	С	CYS	445	47. 427	2. 596	19. 526	1. 00 34. 19
	atom	3451	0	CYS	445	47. 747	3. 783	19. 552	1. 00 36. 00
	atom	3452	N	GLN	446	46. 208	2. 210	19. 189	1. 00 38. 21
10	atom	3453	CA	GLN	446	45. 232	3. 232	18. 843	1. 00 40. 12
	atom	3454	CB	GLN	446	44. 836	3. 088	17. 375	1. 00 43. 49
	atom	3455	CG	GLN	446	44. 134	1. 781	17. 046	1. 00 52. 73
	atom	3456	CD	GLN	446	43. 416	1. 812	15. 698	1. 00 53. 41
	atom	3457	0E1	GLN	446	42. 751	2. 793	15. 356	1. 00 52. 33
15	atom	3458	NE2	GLN	446	43. 547	0. 729	14. 931	1. 00 52. 81
	atom	3459	C	GLN	446	43. 984	3. 293	19. 738	1. 00 38. 91
	atom	3460	0	GLN	446	43. 387	2. 275	20. 087	1. 00 37. 38
	atom	3461	N	ILE	447	43. 621	4. 514	20. 115	1. 00 35. 95
	atom	3462	CA	ILE	447	42. 458	4. 779	20. 950	1. 00 35. 14
20	atom	3463	CB	ILE	447	42. 826	5. 654	22. 194	1. 00 35. 06
	atom	3464	CG2	ILE	447	41. 566	6. 057	22. 954	1. 00 28. 93
	atom	3465	CG1	ILE	447	43. 773	4. 894	23. 124	1. 00 35. 72
	atom	3466	CD1	ILE	447	44. 576	5. 816	24. 017	1. 00 35. 52
	atom	3467	C	ILE	447	41. 499	5. 578	20. 071	1. 00 36. 57
25	atom	3468	0	ILE	447	41. 780	6. 736	19. 729	1. 00 37. 05
	atom	3469	N	TYR	448	40. 380	4. 969	19. 687	1. 00 32. 88
	atom	3470	CA	TYR	448	39. 405			1. 00 29. 32
	atom	3471	CB	TYR	448	38. 867		19. 574	
	atom	3472	CG	TYR	448	37. 916	6. 619		1. 00 35. 92
3 0	atom	3473		TYR	448	37. 379	7. 668		1. 00 34. 37
	atom	3474		TYR	448	36. 485	7. 425		
	atom	3475		TYR	448	37. 529	5. 308	21. 049	1. 00 33. 84
	atom	3476		TYR	448	36. 634	5. 058		1. 00 32. 27
	atom	3477	CZ	TYR	448	36. 118	6. 124		1. 00 33. 86
3 5	atom	3478	OH	TYR	448	35. 242		23. 863	1. 00 34. 45
	atom	3479	С	TYR	448	39. 994	6. 105	17. 513	1. 00 26. 03

	atom	3480	0	TYR	448	39. 660	7. 168	17. 007	1. 00 25. 23
	atom	3481	N	GLY	449	40. 892	5. 303	16. 955	1. 00 25. 14
	atom	3482	CA	GLY	449	41. 467	5. 646	15. 665	1. 00 30. 15
	atom	3483	С	GLY	449	42. 817	6. 336	15. 692	1. 00 29. 86
5	atom	3484	0	GLY	449	43. 684	6. 062	14. 857	1. 00 31. 59
	atom	3485	N	ALA	450	42. 993	7. 258	16. 626	1. 00 30. 00
	atom	3486	CA	ALA	450	44. 265	7. 942	16. 740	1. 00 27. 32
	atom	3487	CB	ALA	450	44. 132	9. 207	17. 585	1. 00 29. 76
	atom	3488	C	ALA	450	45. 190	6. 951	17. 423	1. 00 27. 92
10	atom	3489	0	ALA	450	44. 768	6. 122	18. 240	1. 00 21. 53
	atom	3490	N	CYS	451	46. 456	7. 022	17. 057	1. 00 29. 64
	atom	3491	CA	CYS	451	47. 436	6. 141	17. 640	1. 00 33. 17
	atom	3492	CB	CYS	451	48. 345	5. 611	16. 524	1. 00 27. 89
	atom	3493	SG	CYS	451	50. 112	5. 858	16. 743	1. 00 35. 52
15	atom	3494	C	CYS	451	48. 185	6. 956	18. 720	1. 00 31. 89
	atom	3495	0	CYS	451	48. 393	8. 168	18. 586	1. 00 29. 04
	atom	3496	N	TYR	452	48. 539	6. 309	19. 821	1. 00 31. 86
	atom	3497	CA	TYR	452	49. 242	7. 028	20. 878	1. 00 35. 81
	atom	3498	CB	TYR	452	48. 324	7. 220	22. 095	1. 00 34. 55
20	atom	3499	CG	TYR	452	47. 172	8. 175	21. 868	1. 00 35. 92
	atom	3500	CD1	TYR	452	45. 941	7. 719	21. 381	1. 00 39. 87
	atom	3501	CE1	TYR	452	44. 862	8. 594	21. 203	1. 00 37. 75
	atom	3502	CD2	TYR	452	47. 298	9. 526	22. 161	1. 00 35. 65
	atom	3503	CE2	TYR	452	46. 230	10. 403	21. 987	1. 00 39. 32
25	atom	3504	CZ	TYR	452	45. 021	9. 935	21. 509	1. 00 38. 29
	atom	3505	OH	TYR	452	43. 981	10. 820	21. 357	1. 00 44. 55
	atom	3506	C	TYR	452	50. 531	6. 336	21. 319	1. 00 35. 46
	atom	3507	0	TYR	452	50. 795	5. 173	20. 975	1. 00 34. 31
	atom	3508	N	SER	453	51. 339	7. 067	22. 074	1. 00 34. 30
3 0	atom	3509	CA	SER	453	52. 563	6. 500	22. 581	1. 00 38. 03
	atom	3510	CB	SER	453	53. 733	7. 413	22. 256	1. 00 41. 05
	atom	3511	0G	SER	453	54. 223	7. 101	20. 955	1. 00 47. 23
	atom	3512	C	SER	453	52. 405	6. 315	24. 078	1. 00 35. 40
	atom	3513	0	SER	453	52. 534	7. 261	24. 846	1. 00 35. 22
3 5	atom	3514	N	ILE	454	52. 109	5. 084	24. 476	1. 00 33. 48
	atom	3515	CA	ILE	454	51. 903	4. 767	25. 877	1. 00 36. 42

	atom	3516	CB	ILE	454	50. 510	4. 148	26. 088	1. 00 36. 41
	atom	3517	CG2	ILE	454	50. 079	4. 305	27. 540	1. 00 33. 83
	atom	3518	CG1	ILE	454	49. 514	4. 827	25. 157	1. 00 35. 30
	atom	3519	CD1	ILE	454	48. 079	4. 660	25. 578	1. 00 44. 75
5	atom	3520	C	ILE	454	52. 938	3. 818	26. 461	1. 00 37. 22
	atom	3521	0	ILE	454	53. 294	2. 806	25. 854	1. 00 38. 43
	atom	3522	N	GLU	455	53. 417	4. 153	27. 654	1. 00 38. 85
	atom	3523	CA	GLU	455	54. 386	3. 317	28. 343	1. 00 37. 89
	atom	3524	CB	GLU	455	55. 300	4. 174	29. 215	1. 00 44. 07
10	atom	3525	CG	GLU	455	56. 360	3. 369	29. 960	1. 00 54. 04
	atom	3526	CD	GLU	455	57. 480	4. 247	30. 509	1. 00 61. 38
	atom	3527	0E1	GLU	455	57. 521	5. 453	30. 145	1. 00 60. 82
	atom	3528	0E2	GLU	455	58. 313	3. 730	31. 300	1. 00 58. 53
	atom	3529	С	GLU	455	53. 602	2. 351	29. 216	1. 00 33. 96
15	atom	3530	0	GLU	455	52. 775	2. 765	30. 026	1. 00 31. 59
	atom	3531	N	PRO	456	53. 844	1. 045	29. 061	1. 00 32. 69
	atom	3532	CD	PR0	456	54. 779	0. 431	28. 107	1. 00 31. 89
	atom	3533	CA	PRO	456	53. 117	0. 056	29. 870	1. 00 34. 87
	atom	3534	CB	PR0	456	53. 615	-1. 300	29. 346	1. 00 31. 61
20	atom	3535	CG	PR0	456	54. 819	-1. 005	28. 540	1. 00 31. 68
	atom	3536	C	PRO	456	53. 241	0. 186	31. 404	1. 00 35. 06
	atom	3537	.0	PR0	456	52. 373	-0. 286	32. 150	1. 00 35. 96
	atom	3538	N	LEU	457	54. 302	0. 826	31. 880	1. 00 31. 41
	atom	3539	CA	LEU	457	54. 464	0. 990	33. 318	1. 00 31. 83
25	atom	3540	CB	LEU	457	55. 936	1. 214	33. 668	1. 00 21. 51
	atom	3541	CG	LEU	457	56. 746	-0. 081	33. 628	1. 00 22. 27
	atom	3542	CD1	LEU	457	58. 182	0. 232	33. 223	1. 00 18. 61
	atom	3543	CD2	LEU	457	56. 697	-0. 781	34. 997	1. 00 22. 63
	atom	3544	C	LEU	457	53. 603	2. 147	33. 841	1. 00 33. 12
3 0	atom	3545	0	LEU	457	53. 574	2. 425	35. 046	1. 00 36. 08
	atom	3546	N	ASP	458	52. 899	2. 812	32. 932	1. 00 33. 35
	atom	3547	CA	ASP	458	52. 026	3. 920	33. 306	1. 00 31. 48
	atom	3548	CB	ASP	458	52. 074	5. 004	32. 219	1. 00 31. 92
	atom	3549	CG	ASP	458	53. 235	5. 977	32. 401	1. 00 35. 20
3 5	atom	3550	0D1	ASP	458	53. 988	5. 831	33. 385	1. 00 40. 06
	atom	3551	0D2	ASP	458	53. 398	6. 891	31. 562	1. 00 32. 72

	atom	3552	С	ASP	458	50. 579	3. 402	33. 492	1. 00 30. 57
	atom	3553	0	ASP	458	49. 716	4. 104	34. 020	1. 00 29. 93
	atom	3554	N	LEU	459	50. 337	2. 160	33. 079	1. 00 29. 54
	atom	3555	CA	LEU	459	49. 011	1. 552	33. 172	1. 00 32. 41
5	atom	3556	СВ	LEU	459	49. 097	0. 036	32. 962	1. 00 31. 91
	atom	3557	CG	LEU	459	48. 435	-0. 559	31. 712	1. 00 31. 59
	atom	3558	CD1	LEU	459	47. 692	0. 510	30. 923	1. 00 30. 88
	atom	3559	CD2	LEU	459	49. 508	-1. 226	30. 839	1. 00 33. 41
	atom	3560	С	LEU	459	48. 187	1. 837	34. 422	1. 00 31. 36
10	atom	3561	0	LEU	459	47. 092	2. 379	34. 314	1. 00 35. 42
	atom	3562	N	PR0	460	48. 680	1. 471	35. 618	1. 00 31. 69
	atom	3563	CD	PRO	460	49. 948	0. 798	35. 949	1. 00 37. 70
	atom	3564	CA	PR0	460	47. 893	1. 742	36. 824	1. 00 31. 94
	atom	3565	СВ	PR0	460	48. 867	1. 443	37. 961	1. 00 34. 04
15	atom	3566	CG	PR0	460	49. 768	0. 421	37. 403	1. 00 34. 31
	atom	3567	C	PR0	460	47. 370	3. 172	36. 869	1. 00 31. 06
	atom	3568	0	PRO	460	46. 207	3. 404	37. 171	1. 00 32. 13
	atom	3569	N	GLN	461	48. 240	4. 122	36. 559	1. 00 34. 11
	atom	3570	CA	GLN	461	47. 877	5. 542	36. 539	1. 00 38. 17
2 0	atom	3571	CB	GLN	461	49. 088	6. 398	36. 121	1. 00 38. 18
	atom	3572	CG	GLN	461	50. 311	6. 252	37. 023	1. 00 42. 90
	atom	3573	CD	GLN	461	51. 124	5. 006	36. 725	1. 00 46. 75
	atom	3574	0E1	GLN	461	50. 761	3. 892	37. 128	1. 00 47. 13
	atom	3575	NE2	GLN	461	52. 237	5. 186	36. 018	1. 00 48. 03
25	atom	3576	С	GLN	461	46. 734	5. 780	35. 549	1. 00 34. 45
	atom	3577	0	GLN	461	45. 742	6. 418	35. 873	1. 00 33. 29
	atom	3578	N	ILE	462	46. 894	5. 256	34. 340	1. 00 30. 87
	atom	3579	CA	ILE	462	45. 895	5. 408	33. 289	1. 00 28. 05
	atom	3580	CB	ILE	462	46. 406	4. 806	31. 963	1. 00 28. 23
3 0	atom	3581	CG2	ILE	462	45. 305	4. 784	30. 928	1. 00 21. 36
	atom	3582	CG1	ILE	462	47. 603	5. 621	31. 466	1. 00 28. 26
	atom	3583	CD1	ILE	462	48. 241	5. 073	30. 227	1. 00 30. 74
	atom	3584	C	ILE	462	44. 607	4. 712	33. 688	1. 00 27. 56
	atom	3585	0	ILE	462	43. 534	5. 332	33. 726	1. 00 27. 06
3 5	atom	3586	N	ILE	463	44. 725	3. 424	33. 996	1. 00 22. 72
	atom	3587	CA	ILE	463	43. 574	2. 636	34. 400	1. 00 20. 93

	atom	3588	CB	ILE	463	44. 003	1. 216	34. 896	1. 00 21. 25
	atom	3589	CG2	ILE	463	42. 817	0. 479	35. 517	1. 00 18. 27
	atom	3590	CG1	ILE	463	44. 537	0. 396	33. 715	1. 00 16. 48
	atom	3591	CD1	ILE	463	45. 126	-0. 924	34. 099	1. 00 9. 67
5	atom	3592	С	ILE	463	42. 758	3. 351	35. 480	1. 00 19. 90
	atom	3593	0	ILE	463	41. 537	3. 416	35. 375	1. 00 22. 61
	atom	3594	N	GLU	464	43. 418	3. 903	36. 497	1. 00 22. 67
	atom	3595	CA	GLU	464	42. 710	4. 592	37. 581	1. 00 23. 09
	atom	3596	CB	GLU	464	43. 654	4. 981	38. 726	1. 00 22. 31
10	atom	3597	CG	GLU	464	42. 882	5. 206	40. 033	1. 00 24. 89
	atom	3598	CD	GLU	464	43. 508	6. 229	40. 954	1. 00 22. 17
	atom	3599	0E1	GLU	464	43. 109	7. 406	40. 905	1. 00 31. 72
	atom	3600	0E2	GLU	464	44. 390	5. 865	41. 738	1. 00 16. 70
	atom	3601	С	GLU	464	41. 959	5. 840	37. 132	1. 00 25. 17
15	atom	3602	0	GLU	464	40. 845	6. 102	37. 610	1. 00 21. 06
	atom	3603	N	ARG	465	42. 562	6. 609	36. 225	1. 00 24. 41
	atom	3604	CA	ARG	465	41. 920	7. 818	35. 729	1. 00 25. 52
	atom	3605	СВ	ARG	465	42. 908	8. 681	34. 943	1. 00 31. 25
	atom	3606	CG	ARG	465	43. 219	10. 019	35. 642	1. 00 39. 07
20	atom	3607	CD	ARG	465	42. 685	11. 216	34. 860	1. 00 43. 22
	atom	3608	NE	ARG	465	43. 641	12. 326	34. 767	1. 00 47. 82
	atom	3609	CZ	ARG	465	44. 942	12. 198	34. 504	1. 00 50. 16
	atom	3610	NH1	ARG	465	45. 481	11. 002	34. 303	1. 00 51. 31
	atom	3611	NH2	ARG	465	45. 711	13. 276	34. 421	1. 00 50. 41
25	atom	3612	C	ARG	465	40. 700	7. 524	34. 864	1. 00 22. 97
	atom	3613	0	ARG	465	39. 681	8. 210	34. 986	1. 00 17. 94
	atom	3614	N	LEU	466	40. 800	6. 486	34. 031	1. 00 19. 59
	atom	3615	CA	LEU	466	39. 729	6. 087	33. 122	1. 00 24. 29
	atom	3616	CB	LEU	466	40. 314	5. 360	31. 904	1. 00 22. 68
3 0	atom	3617	CG	LEU	466	41. 009	6. 289	30. 905	1. 00 31. 93
	atom	3618	CD1	LEU	466	41. 374	5. 545	29. 624	1. 00 31. 87
	atom	3619	CD2	LEU	466	40. 074	7. 457	30. 599	1. 00 36. 14
	atom	3620	C	LEU	466	38. 609	5. 227	33. 692	1. 00 27. 95
	atom	3621	0	LEU	466	37. 461	5. 286	33. 219	1. 00 30. 02
3 5	atom	3622	N	HIS	467	38. 923	4. 420	34. 693	1. 00 26. 38
	atom	3623	CA	HIS	467	37. 901	3. 554	35. 240	1. 00 28. 67

	atom	3624	СВ	HIS	467	38. 215	2. 094	34. 905	1. 00 28. 83
	atom	3625	CG	HIS	467	38. 546	1. 853	33. 465	1. 00 28. 42
	atom	3626	CD2	HIS	467	39. 716	1. 958	32. 789	1. 00 28. 48
	atom	3627	ND1	HIS	467	37. 620	1. 385	32. 557	1. 00 29. 37
5	atom	3628	CE1	HIS	467	38. 205	1. 209	31. 386	1. 00 23. 72
	atom	3629	NE2	HIS	467	39. 478	1. 549	31. 501	1. 00 26. 25
	atom	3630	С	HIS	467	37. 681	3. 673	36. 734	1. 00 28. 76
	atom	3631	0	HIS	467	36. 669	3. 188	37. 246	1. 00 31. 17
	atom	3632	N	GLY	468	38. 611	4. 313	37. 435	1. 00 27. 32
10	atom	3633	CA	GLY	468	38. 475	4. 421	38. 875	1. 00 24. 96
	atom	3634	С	GLY	468	39. 180	3. 265	39. 570	1. 00 26. 11
	atom	3635	0	GLY	468	39. 347	2. 187	38. 992	1. 00 20. 04
	atom	3636	N	LEU	469	39. 604	3. 504	40. 810	1. 00 28. 32
	atom	3637	CA	LEU	469	40. 303	2. 506	41. 619	1. 00 31. 09
15	atom	3638	CB	LEU	469	40. 497	3. 027	43. 050	1. 00 34. 04
	atom	3639	CG	LEU	469	41. 631	2. 433	43. 893	1. 00 33. 39
	atom	3640	CD1	LEU	469	42. 976	2. 827	43. 310	1. 00 29. 13
	atom	3641	CD2	LEU	469	41. 509	2. 939	45. 332	1. 00 36. 67
	atom	3642	С	LEU	469	39. 572	1. 177	41. 669	1. 00 30. 69
20	atom	3643	0	LEU	469	40. 203	0. 121	41. 757	1. 00 32. 77
	atom	3644	N	SER	470	38. 243	1. 240	41. 617	1. 00 28. 25
	atom	3645	CA	SER	470	37. 399	0. 050	41. 658	1. 00 26. 30
	atom	3646	CB	SER	470	35. 967	0. 416	41. 294	1. 00 29. 68
	atom	3647	0G	SER	470	35. 871	0. 665	39. 903	1. 00 32. 61
25	atom	3648	С	SER	470	37. 896	-0. 988	40. 677	1. 00 26. 83
	atom	3649	0	SER	470	37. 786	−2. 187	40. 908	1. 00 29. 66
	atom	3650	N	ALA	471	38. 433	-0. 501		
	atom	3651	CA	ALA	471	38. 957	-1. 346	38. 518	1. 00 25. 29
	atom	3652	CB	ALA	471	39. 607	-0. 481	37. 436	1. 00 23. 68
3 0	atom	3653	С	ALA	471	39. 970		39. 081	1. 00 24. 06
	atom	3654	0	ALA	471	40. 142	-3. 416	38. 556	1. 00 21. 95
	atom	3655	N	PHE	472	40. 648	-1. 940	40. 151	1. 00 22. 90
	atom	3656	CA	PHE	472	41. 631	-2. 831	40. 745	1. 00 22. 67
	atom	3657	CB	PHE	472	42. 758	-2. 010	41. 375	1. 00 21. 44
3 5	atom	3658	CG	PHE	472	43. 412		40. 424	1. 00 22. 73
	atom	3659	CD1	PHE	472	43. 519	0. 321	40. 750	1. 00 25. 96

```
1. 00 22. 57
                                                     -1.467
                                                               39. 207
                     CD2 PHE
                                 472
                                           43. 936
      atom
              3660
                                                                        1.00 24.45
                                 472
                                           44. 145
                                                      1. 241
                                                               39. 863
              3661
                     CE1 PHE
      atom
                     CE2 PHE
                                 472
                                            44. 567
                                                     -0.560
                                                               38. 312
                                                                        1. 00 19. 58
              3662
      atom
                                                                        1. 00 18. 43
                                            44. 668
                                                      0. 791
                                                               38. 642
      atom
              3663
                     CZ
                          PHE
                                 472
                                                               41. 780
                          PHE
                                 472
                                            41. 045
                                                     -3.806
                                                                        1. 00 19. 61
              3664
                     C
 5
      atom
                                                               42. 433
                                                                        1.00 20.06
                          PHE
                                 472
                                            41. 796
                                                     -4.509
              3665
                     0
      atom
                                                               41.889
                                                                        1. 00 17. 33
                                            39. 717
                                                     -3.887
              3666
                     N
                          SER
                                 473
      atom
                                                     -4.771
                                                               42. 864
                                                                        1. 00 19. 26
                          SER
                                 473
                                            39. 087
              3667
                     CA
      atom
                                            38. 894
                                                     -4.015
                                                               44. 182
                                                                        1. 00 15. 31
              3668
                     CB
                          SER
                                 473
      atom
                                                                        1. 00 22. 47
                                 473
                                            39. 568
                                                     -2.768
                                                               44. 152
      atom
              3669
                     0G
                          SER
10
                                                               42. 501
                                                                        1. 00 24. 97
                                 473
                                            37. 747
                                                     -5. 447
              3670
                     C
                          SER
      atom
                                                               43. 390
                                                                        1. 00 26. 79
                          SER
                                 473
                                            37.088
                                                     -6.025
              3671
                     0
      atom
                                                                        1. 00 19. 87
                                                               41. 239
                                 474
                                            37. 322
                                                     -5.384
              3672
                     N
                          LEU
      atom
                                                               40. 853
                                                                        1. 00 17. 55
                                            36.064
                                                     -6.032
                     CA
                          LEU
                                 474
              3673
      atom
                                                                        1. 00 16. 67
                     CB
                          LEU
                                 474
                                            35. 741
                                                     -5.734
                                                               39. 398
      atom
              3674
15
                                                                        1. 00 19. 81
                                                     -4. 253
                                                               39. 139
              3675
                     CG
                          LEU
                                 474
                                            35. 419
      atom
                     CD1 LEU
                                            35. 037
                                                     -4.078
                                                               37. 684
                                                                        1. 00 16. 66
                                 474
              3676
      atom
                                                               40.027
                                                                         1.00 19.28
                                            34. 284
                                                     -3.777
              3677
                     CD2 LEU
                                 474
      atom
                                                                        1. 00 16. 76
                                                     -7.544
                                                               41. 097
                                 474
                                            36. 195
              3678
                     C
                          LEU
      atom
                                                                         1.00 14.80
                                 474
                                            37. 261
                                                     -8. 115
                                                               40.867
              3679
                     0
                          LEU
20
      atom
                                            35. 122
                                                                         1. 00 17. 09
                                                     -8. 183
                                                               41. 577
      atom
              3680
                     N
                          HIS
                                 475
                                                                        1. 00 20. 48
                                            35. 189
                                                     -9.595
                                                               41. 917
              3681
                     CA
                          HIS
                                 475
      atom
                                                                         1. 00 23. 75
              3682
                     CB
                          HIS
                                 475
                                            35. 651
                                                     -9.737
                                                               43. 382
      atom
                                                               44. 373
                                                                         1. 00 23. 68
                          HIS
                                            34. 738
                                                     -9.069
              3683
                     CG
                                 475
      atom
                     CD2 HIS
                                            34. 748
                                                     -7.811
                                                               44. 893
                                                                         1. 00 23. 89
              3684
                                 475
      atom
25
                                                                         1. 00 15. 87
                                            33. 598
                                                     -9.668
                                                               44. 857
              3685
                     ND1 HIS
                                 475
      atom
                                                               45. 623
                                                                         1. 00 18. 64
                                 475
                                            32. 939
                                                     -8. 815
              3686
                     CE1 HIS
      atom
                                            33. 619
                                                     -7. 680
                                                               45. 660
                                                                         1. 00 17. 92
              3687
                     NE2 HIS
                                 475
      atom
                                                                         1. 00 23. 35
                          HIS
                                 475
                                            33. 972 -10. 490
                                                               41. 703
              3688
                     C
      atom
                                                               41. 395
                                                                         1. 00 32. 81
                                            34. 113 -11. 667
                          HIS
                                 475
              3689
                     0
30
      atom
                          SER
                                 476
                                            32. 772 -9. 986
                                                               41.864
                                                                         1. 00 23. 75
              3690
                     N
      atom
                                                                         1. 00 25. 31
                                            31. 647 -10. 896
                                                               41. 683
               3691
                     CA
                          SER
                                 476
      atom
                                                                         1.00 25.03
                                                               42. 808
                                 476
                                            30. 632 -10. 674
               3692
                     CB
                          SER
      atom
                                            31. 256 -10. 944
                                                               44. 047
                                                                         1.00 25.05
               3693
                     0G
                          SER
                                 476
      atom
                                 476
                                            31. 016 -10. 707
                                                               40. 311
                                                                         1. 00 26. 91
               3694
                     C
                          SER
35
      atom
                                                               40. 189
                                                                         1.00 21.63
                                 476
                                            29. 891 -10. 203
               3695
                     0
                          SER
      atom
```

	atom	3696	N	TYR	477	31.	774	-11.	114	39.	287	1. 0	0 :	27.	12
	atom	3697	CA	TYR	477	31.	382	-10.	999	37.	888	1. 0	0 :	20. !	57
	atom	3698	СВ	TYR	477	32.	517	-11.	476	36.	980	1. 0	0	19.	34
	atom	3699	CG	TYR	477	33.	662	-10.	492	36.	852	1. 0	0	18.	80
5	atom	3700	CD1	TYR	477	34.	885	-10.	722	37.	514	1. 0	0	19.	07
	atom	3701	CE1	TYR	477	35.	955	-9.	831	37.	400	1. 0	0	13.	98
	atom	3702	CD2	TYR	477	33.	541	-9 .	339	36.	067	1. 0	0	13.	86
	atom	3703	CE2	TYR	477	34.	615	-8.	434	35.	942	1. 0	0	13.	49
	atom	3704	CZ	TYR	477	35.	817	-8.	689	36.	612	1. 0	0	16.	89
10	atom	3705	ОН	TYR	477	36.	878	-7 .	817	36.	501	1. 0	0	14.	53
	atom	3706	С	TYR	477	30.	126	-11.	777	37.	577	1. 0	0	21.	86
	atom	3707	0	TYR	477	29.	913	-12.	852	38.	113	1. 0	0	16.	61
	atom	3708	N	SER	478	29.	304	-11.	219	36.	686	1. 0	0	25.	77
	atom	3709	CA	SER	478	28	030	-11.	820	36.	285	1. 0	0	27.	29
15	atom	3710	CB	SER	478	27.	289	-10.	875	35.	339	1. 0	0	28.	80
	atom	3711	0G	SER	478	27.	483	-9.	522	35.	731	1. 0	0	40.	31
	atom	3712	С	SER	478	28	165	-13.	186	35.	628	1. 0	0	27.	44
	atom	3713	0	SER	478	29	099	-13.	423	34.	876	1. 0	0	31.	57
	atom	3714	N	PR0	479	27.	229	-14.	109	35 .	910	1. 0	0	25.	94
20	atom	3715	CD	PR0	479	26	. 087	-13.	974	36.	828	1. 0	0	22 .	83
	atom	3716	CA	PR0	479	27.	286	-15.	450	35.	314	1. 0	0	21.	99
	atom	3717	CB	PR0	479			-16.			859			21.	
	atom	3718	CG	PR0	479			−15 .			166			24.	
	atom	3719	C	PRO	479			-15.			790			22.	
25	atom	3720	0	PRO	479			-16.			104			16.	
	atom	3721	N	GLY	480			-14.			253			25.	
	atom	3722	CA	GLY	480			-14.			808			30.	
	atom	3723	С	GLY	480			-13.			315			29.	
	atom	3724	0	GLY	480			-14			382			32.	
3 0	atom	3725	N	GLU	481			-13.			971			28.	
	atom	3726	CA	GLU	481			-12			609			23.	
	atom	3727	CB	GLU	481			-11			406			20.	
	atom	3728	CG	GLU	481			-10.			070			21.	
	atom	3729	CD	GLU	481			-10			731			19.	
3 5	atom	3730	0E1		481			-10			074			20.	
	atom	3731	0E2	GLU	481	32	. 994	-9.	713	30.	343	1. 0	0	14.	84

```
31. 123 -13. 782
                                                              31. 811
                                                                        1.00 23.04
                          GLU
                                 481
      atom
              3732
                    C
                                                                        1.00 25.54
                                 481
                                            31. 966 -14. 028
                                                              30. 958
              3733
                     0
                          GLU
      atom
                          ILE
                                 482
                                            31. 040 -14. 470
                                                              32. 937
                                                                        1. 00 23. 36
              3734
                     N
      atom
                                                                        1. 00 22. 76
                                            31. 963 -15. 565
                                                               33. 220
      atom
              3735
                     CA
                          ILE
                                 482
              3736
                     CB
                          ILE
                                 482
                                            31. 638 -16. 214
                                                              34. 601
                                                                        1. 00 19. 81
      atom
 5
                                                                        1. 00 15. 83
              3737
                     CG2 ILE
                                 482
                                            32. 395 -17. 523
                                                               34. 778
      atom
                                                                        1. 00 23. 83
                     CG1 ILE
                                 482
                                            32. 010 -15. 250
                                                               35. 739
              3738
      atom
                                 482
                                            31. 125 -15. 395
                                                               36. 991
                                                                        1. 00 10. 56
              3739
                     CD1 ILE
      atom
                     C
                          ILE
                                 482
                                            31. 881 -16. 636
                                                               32. 132
                                                                        1. 00 22. 80
      atom
              3740
              3741
                          ILE
                                 482
                                            32. 896 -17. 185
                                                               31. 692
                                                                        1. 00 19. 29
10
      atom
                     0
                                                               31.699
                                                                        1.00 24.99
                          ASN
                                 483
                                            30. 659 -16. 923
              3742
                     N
      atom
                                                                        1.00 26.00
              3743
                     CA
                          ASN
                                 483
                                            30. 435 -17. 945
                                                               30.698
      atom
                                                               30.716
                                                                        1. 00 28. 37
                     CB
                          ASN
                                 483
                                            28. 969 -18. 345
      atom
              3744
                                                               32.002
                                                                        1. 00 31. 91
                                 483
                                            28. 590 -19. 073
              3745
                     CG
                          ASN
      atom
              3746
                     OD1 ASN
                                 483
                                            27. 471 -18. 946
                                                               32. 500
                                                                        1. 00 30. 31
15
      atom
                                            29. 530 -19. 841
                                                               32. 542
                                                                        1. 00 29. 92
              3747
                     ND2 ASN
                                 483
      atom
                          ASN
                                 483
                                            30. 877 -17. 563
                                                               29. 300
                                                                        1. 00 26. 60
              3748
                     C
      atom
                                                                        1.00 30.66
                                 483
                                            31. 177 -18. 434
                                                               28. 497
      atom
              3749
                     0
                          ASN
                                 484
                                            30. 902 -16. 271
                                                               28. 997
                                                                        1. 00 27. 04
              3750
                          ARG
                     N
      atom
                                                                        1.00 27.37
                          ARG
                                 484
                                            31. 363 -15. 830
                                                               27. 687
              3751
                     CA
20
      atom
                                                                        1. 00 26. 13
                                 484
                                            31. 201 -14. 317
                                                               27. 520
      atom
              3752
                     CB
                          ARG
                                                               26. 325
                                 484
                                            30. 361 -13. 921
                                                                        1. 00 21. 21
              3753
                     CG
                          ARG
      atom
              3754
                     CD
                          ARG
                                 484
                                            30. 981 -12. 821
                                                               25. 556
                                                                        1. 00 17. 82
      atom
                                                               26. 361
                                                                        1.00 19.84
                          ARG
                                 484
                                            31. 222 -11. 629
               3755
                     NE
      atom
                     CZ
                                 484
                                            30. 484 -10. 531
                                                               26. 282
                                                                        1.00 18.20
              3756
                          ARG
      atom
25
                                 484
                                                               25. 447
                                                                        1. 00 22. 95
              3757
                      NH1 ARG
                                            29. 462 -10. 472
      atom
                                                               27.005
                                                                        1. 00 17. 83
               3758
                      NH2 ARG
                                 484
                                            30. 792 -9. 477
      atom
                      C
                                 484
                                            32. 841 -16. 174
                                                               27. 637
                                                                        1. 00 26. 63
      atom
               3759
                          ARG
               3760
                                 484
                                            33. 268 -17. 021
                                                               26. 861
                                                                        1. 00 27. 51
      atom
                      0
                          ARG
                                            33. 612 -15. 507
                                                               28. 491
                                                                        1.00 25.94
               3761
                      N
                          VAL
                                 485
      atom
30
                      CA
                          VAL
                                 485
                                            35. 048 -15. 721
                                                               28. 581
                                                                        1. 00 20. 15
               3762
      atom
                                 485
                                            35. 633 -15. 070
                                                               29. 836
                                                                        1. 00 21. 83
               3763
                      CB
                          VAL
      atom
                                                               29. 970
                                                                        1. 00 13. 97
               3764
                                 485
                                            37. 121 −15. 461
                      CG1 VAL
      atom
                      CG2 VAL
                                            35. 419 -13. 566
                                                               29. 793
                                                                        1. 00 7. 66
      atom
               3765
                                  485
               3766
                      C
                          VAL
                                  485
                                            35. 399 -17. 191
                                                               28. 660
                                                                        1. 00 19. 86
35
      atom
                                                               27. 815
                                                                         1.00 21.45
               3767
                      0
                          VAL
                                  485
                                            36. 117 −17. 710
      atom
```

	atom	3768	N	ALA	486	34.	900	-17.	847	29.	699	1. 00) 2	20. 8	36
	atom	3769	CA	ALA	486	35.	175	-19.	265	29.	928	1. 00) 2	23. ()5
	atom	3770	СВ	ALA	486	34.	380	-19.	781	31.	157	1. 00) 1	16. 7	74
	atom	3771	C	ALA	486	34.	888	-20.	127	28.	704	1. 00) 1	19. 3	32
5	atom	3772	0	ALA	486	35.	545	-21 .	134	28.	492	1. 00) 1	18. 4	16
	atom	3773	N	SER	487	33.	898	-19.	746	27.	910	1. 00) 2	23. ()8
	atom	3774	CA	SER	487	33.	594	-20.	493	26.	699	1. 00) 2	25. 5	52
	atom	3775	CB	SER	487	32	197	-20.	141	26.	176	1. 0) 2	26. 8	32
	atom	3776	0G	SER	487	31.	572	-21.	282	25 .	597	1. 0) 3	32. 2	23
10	atom	3777	C	SER	487	34	642	-20.	132	25 .	646	1. 0) 2	23. 8	35
	atom	3778	0	SER	487	35	121	-20 .	981	24.	903	1. 0	3	30. 9	98
	atom	3779	N	CYS	488	35	004	-18.	865	25.	584	1. 0) 2	20. 3	37
	atom	3780	CA	CYS	488	35	991	-18.	441	24.	617	1. 0) 2	21. 9	3 5
	atom	3781	CB	CYS	488	36	079	-16.	918	24.	589	1. 0	0 2	27. 1	12
15	atom	3782	SG -	CYS	488	37	671	-16.	295	23.	964	1. 0	0 3	35. 9	96
	atom	3783	C	CYS	488	37	374	-19.	017	24.	911	1. 0	0 2	22. 9	98
	atom	3784	0	CYS	488	38	218	-19.	080	24.	019	1. 0	0 .	16. 4	47
	atom	3785	N	LEU	489	37	629	−19 .	425	26.	153	1. 0	0 2	21. 1	12
	atom	3786	CA	LEU	489	38	949	-19.	966	26.	456	1. 0	0 2	24. 9	98
20	atom	3787	CB	LEU	489	39	232	−19 .	926	27.	959	1. 0	0 2	23. 4	49
	atom	3788	CG	LEU	489	39	134	−18 .	554	28.	631	1. 0	0 2	24. 4	48
	atom	3789	CD1	LEU	489	39	. 791	-18.	618	30.	800	1. 0	0 2	27. 3	39
	atom	3790	CD2	LEU	489	39	. 794	-17.	494	27.	765	1. 0	0	15. (03
	atom	3791	C	LEU	489	39	. 055	-21.	382		912	1. 0			
2 5 ₁	atom	3792	0	LEU	489			-21.			336	1. 0			
	atom	3793	N	ARG	490				162		077	1. 0			
	atom	3794	CA	ARG	490			−23 .			559			35. (
	atom	3795	CB	ARG	490				241		837	1. 0			
	atom	3796	CG	ARG.	490			−23 .			102			39.	
3 0	atom	3797	CD	ARG	490				331		330			46.	
	atom	3798	NE	ARG	490			-25 .			036			49.	
	atom	3799	CZ	ARG	490			-25.			338			48.	
	atom	3800		ARG	490			-24			953			50.	
	atom	3801		ARG	490				813		015			45.	
35	atom	3802	C	ARG	490				455		042			33.	
	atom	3803	0	ARG	490	39	. 071	-24	085	23.	488	1. 0	0	34.	18

```
37. 331 -22. 651
                                                                23. 396
                                                                          1. 00 33. 18
                           LYS
                                  491
              3804
                      N
      atom
                                                                          1. 00 30. 62
                                             37. 350 −22. 469
                                                                21. 949
                          LYS
                                  491
              3805
                      CA
      atom
                                             36. 399 -21. 339
                                                                 21. 551
                                                                          1. 00 31. 61
              3806
                      CB
                          LYS
                                  491
      atom
                                             36. 178 −21. 210
                                                                 20. 053
                                                                          1. 00 23. 96
      atom
              3807
                      CG
                          LYS
                                  491
                                             36. 306 -19. 782
                                                                19. 606
                                                                          1. 00 19. 54
               3808
                      CD
                          LYS
                                  491
 5
      atom
                          LYS
                                             34. 973 -19. 080
                                                                 19.677
                                                                          1.00 17.94
               3809
                      CE
                                  491
      atom
                                                                 20. 232
                                                                          1. 00 17. 67
                                             35. 126 −17. 705
                      NZ
                          LYS
                                  491
      atom
               3810
                                                                 21. 384
                                                                           1.00 29.09
                                             38. 722 -22. 181
                      C
                           LYS
                                  491
      atom
               3811
                                             39. 187 -22. 897
                                                                 20. 503
                                                                           1. 00 35. 24
               3812
                      0
                           LYS
                                  491
      atom
                           LEU
                                             39. 369 -21. 138
                                                                 21. 893
                                                                           1. 00 24. 34
               3813
                      N
                                  492
10
      atom
                                                                 21. 401
                                                                           1.00 19.50
                                             40. 679 -20. 755
                          LEU
                                  492
               3814
                      CA
      atom
                                                                           1.00 19.76
                          LEU
                                  492
                                             40. 993 -19. 286
                                                                 21. 743
               3815
                      CB
      atom
                                                                           1. 00 21. 61
                                  492
                                             40. 131 -18. 223
                                                                 21. 032
               3816
                      CG
                         LEU
      atom
                                                                 21. 255
                                                                           1. 00 14. 82
                                             40. 670 -16. 834
                      CD1 LEU
                                  492
               3817
      atom
                      CD2 LEU
                                  492
                                             40. 088 -18. 522
                                                                 19. 560
                                                                           1. 00 20. 60
               3818
15
      atom
                                                                 21. 949
                                                                           1. 00 19. 62
                           LEU
                                  492
                                             41. 763 -21. 639
      atom
               3819
                      C
                                  492
                                             42. 872 -21. 679
                                                                 21. 413
                                                                           1. 00 19. 94
               3820
                           LEU
                      0
      atom
                                             41. 447 -22. 362
                                                                 23.014
                                                                           1. 00 20. 58
               3821
                      N
                           GLY
                                  493
      atom
                                                                 23. 615
                                                                           1. 00 15. 08
                           GLY
                                  493
                                             42. 451 -23. 220
      atom
               3822
                      CA
                                             43. 358 -22. 412
                                                                 24. 528
                                                                           1. 00 17. 40
               3823
                      C
                           GLY
                                  493
20
      atom
                                                                           1. 00 12. 58
                                             44. 549 -22. 733
                                                                 24. 699
      atom
               3824
                      0
                           GLY
                                  493
                                             42. 811 -21. 332
                                                                 25. 085
                                                                           1. 00 18. 23
               3825
                      N
                           VAL
                                  494
      atom
               3826
                      CA
                           VAL
                                  494
                                             43. 567 -20. 505
                                                                 26. 029
                                                                           1. 00 24. 48
      atom
                                                                           1. 00 25. 08
                                             42. 927 -19. 093
                                                                 26. 182
                           VAL
                                  494
      atom
               3827
                      CB
                                             43. 639 -18. 302
                                                                 27. 263
                                                                           1. 00 19. 85
                      CG1 VAL
                                  494
               3828
25
      atom
                                                                 24.869
                                                                           1. 00 23. 44
               3829
                      CG2 VAL
                                  494
                                             43. 032 -18. 344
      atom
                                                                           1. 00 21. 96
                                             43. 523 -21. 267
                                                                 27. 369
                           VAL
                                  494
      atom
               3830
                      C
                                             42. 544 -21. 966
                                                                 27. 650
                                                                           1. 00 23. 77
               3831
                      0
                           VAL
                                  494
      atom
                                   495
                                             44. 591 -21. 193
                                                                 28. 180
                                                                           1. 00 19. 53
               3832
                      N
                           PR<sub>0</sub>
      atom
                                                                 27. 998
                                                                           1. 00 22. 34
                           PR<sub>0</sub>
                                   495
                                             45. 876 -20. 502
               3833
                      CD
3 0
      atom
                                  495
                                              44. 532 -21. 925
                                                                 29. 452
                                                                           1. 00 23. 72
               3834
                      CA
                           PR<sub>0</sub>
      atom
                                                                           1. 00 22. 00
                                                                 29. 992
               3835
                      CB
                           PR<sub>0</sub>
                                   495
                                              45. 966 -21. 847
      atom
                                                                 29. 327
                                                                           1. 00 22 88
                                              46. 564 -20. 672
                      CG
                           PR0
                                   495
       atom
               3836
                                              43. 495 -21. 359
                                                                 30. 428
                                                                           1. 00 24. 18
               3837
                      C
                           PR<sub>0</sub>
                                   495
       atom
                                              43. 237 -20. 166
                                                                 30. 425
                                                                           1. 00 26. 06
               3838
                      0
                           PR<sub>0</sub>
                                   495
35
       atom
                                                                 31. 253
                                                                           1. 00 29. 06
                                              42. 867 -22. 227
                           PR0
                                   496
       atom
               3839
                      N
```

```
43. 117 -23. 682
                                                                31. 251
                                                                         1.00 29.39
                                 496
              3840
                     CD
                          PR0
      atom
                                                                         1.00 26.64
                                            41. 843 -21. 870
                                                               32. 256
                          PR<sub>0</sub>
                                 496
              3841
                     CA
      atom
                                            41. 639 -23. 175
                                                                33. 025
                                                                         1. 00 26. 28
                     CB
                          PR<sub>0</sub>
                                 496
      atom
              3842
                                                                32. 014
                                                                         1. 00 27. 86
                                            41. 942 -24. 230
      atom
              3843
                     CG
                          PR0
                                 496
                                            42. 220 -20. 709
                                                               33. 191
                                                                         1. 00 24. 39
                     C
                          PR0
                                 496
              3844
 5
      atom
                                            43. 382 -20. 560
                                                                33. 560
                                                                         1. 00 25. 02
              3845
                     0
                          PR0
                                 496
      atom
                                                                         1. 00 22. 77
                                            41. 235 -19. 901
                                                                33. 580
              3846
                     N
                          LEU
                                 497
      atom
                                                                34. 476
                                                                         1. 00 25. 05
                          LEU
                                 497
                                            41. 479 -18. 762
      atom
              3847
                     CA
                                            40. 174 -18. 055
                                                                34. 832
                                                                         1. 00 22. 12
              3848
                     CB
                          LEU
                                 497
      atom
                          LEU
                                  497
                                            39. 459 -17. 316
                                                                33. 694
                                                                         1. 00 24. 99
              3849
                     CG
10
      atom
                                                                         1. 00 10. 42
                                            37. 983 -17. 213
                                                                34. 013
                     CD1 LEU
                                 497
              3850
      atom
                                                                         1. 00 22. 67
                     CD2 LEU
                                  497
                                             40. 089 -15. 948
                                                                33. 486
              3851
      atom
                                                                35. 767
                                                                         1. 00 28. 83
                                            42. 171 -19. 192
              3852
                     C
                          LEU
                                  497
      atom
                                                                36. 231
                                                                         1. 00 30. 24
                                             43. 112 -18. 534
                          LEU
                                  497
              3853
                     0
      atom
                          ARG
                                  498
                                             41. 709 -20. 291
                                                                36. 354
                                                                         1. 00 28. 96
              3854
                     N
15
      atom
                                             42. 318 -20. 776
                                                                37. 585
                                                                         1. 00 31. 80
              3855
                          ARG
                                  498
      atom
                     CA
                                  498
                                             41. 849 -22. 192
                                                                37. 881
                                                                         1. 00 33. 41
              3856
                          ARG
                     CB
      atom
                                             42. 803 -23. 240
                                                                37. 364
                                                                         1. 00 36. 66
              3857
                     CG
                          ARG
                                  498
      atom
                                                                         1. 00 34. 50
                          ARG
                                  498
                                             42. 101 -24. 168
                                                                36. 443
      atom
              3858
                     CD
                                             41. 020 -24. 850
                                                                37. 130
                                                                         1. 00 35. 78
                          ARG
                                  498
              3859
                     NE
20
      atom
                                             40. 765 -26. 148
                                                                37. 006
                                                                          1. 00 41. 82
      atom
              3860
                     CZ
                          ARG
                                  498
                                             41. 523 -26. 904
                                                                36. 215
                                                                         1. 00 41. 86
              3861
                     NH1 ARG
                                  498
      atom
                      NH2 ARG
                                  498
                                             39. 751 -26. 691
                                                                37. 672
                                                                          1. 00 40. 78
              3862
      atom
                                                                          1. 00 30. 31
                                             43. 829 -20. 769
                                                                37. 416
                          ARG
                                  498
      atom
               3863
                      C
                                             44. 561 -20. 349
                                                                38. 310
                                                                          1.00 33.99
                          ARG
                                  498
               3864
                      0
25
      atom
                                                                36. 250
                                                                          1. 00 29. 25
               3865
                     N
                          VAL
                                  499
                                             44. 285 -21. 216
      atom
                                                                          1. 00 31. 50
                                             45. 712 -21. 278
                                                                35. 947
                      CA
                          VAL
                                  499
      atom
               3866
                                             45. 972 -22. 101
                                                                34. 640
                                                                          1.00 33.12
               3867
                      CB
                          VAL
                                  499
      atom
                                  499
                                             47. 390 -21. 877
                                                                34. 132
                                                                          1. 00 28. 70
               3868
                      CG1 VAL
      atom
                                                                34. 906
                                                                          1. 00 31. 44
                      CG2 VAL
                                  499
                                             45. 735 -23. 587
               3869
30
      atom
                                  499
                                             46. 377 -19. 901
                                                                35. 829
                                                                          1.00 31.96
                      C
                          VAL
               3870
      atom
                                                                36. 190
                                                                          1. 00 35. 00
               3871
                      0
                          VAL
                                  499
                                             47. 547 -19. 753
      atom
                                                                35. 324
                                                                          1. 00 31. 77
                                             45. 648 -18. 901
                           TRP
                                  500
      atom
               3872
                      N
                                                                35. 181
                                                                          1. 00 27. 36
               3873
                      CA
                          TRP
                                  500
                                             46. 198 -17. 546
      atom
                                                                34. 333
                                                                          1. 00 25. 16
                                  500
                                             45. 277 -16. 663
               3874
                      CB
                           TRP
35
      atom
                                                                          1. 00 26. 28
                                  500
                                             45. 213 -17. 041
                                                                32. 882
               3875
                      CG
                           TRP
      atom
```

	atom	3876	CD2	TRP	500	46. 174 -16. 737	31. 862	1. 00 26. 06
	atom	3877	CE2	TRP	500	45. 698 -17. 303	30. 658	1. 00 27. 61
	atom	3878	CE3	TRP	500	47. 386 -16. 039	31. 846	1. 00 29. 91
	atom	3879	CD1	TRP	500	44. 225 -17. 760	32. 270	1. 00 25. 36
5	atom	3880	NE1	TRP	500	44. 510 -17. 921	30. 938	1. 00 25. 93
	atom	3881	CZ2	TRP	500	46. 396 -17. 200	29. 451	1. 00 30. 21
	atom	3882	CZ3	TRP	500	48. 083 -15. 934	30. 645	1. 00 31. 35
	atom	3883	CH2	TRP	500	47. 583 -16. 510	29. 461	1. 00 32. 07
	atom	3884	C	TRP	500	46. 366 -16. 926	36. 574	1. 00 28. 41
10	atom	3885	0	TRP	500	47. 248 -16. 073	36. 803	1. 00 23. 28
	atom	3886	N	ARG	501	45. 507 -17. 361	37. 496	1. 00 27. 19
	atom	3887	CA	ARG	501	45. 556 -16. 910	38. 880	1. 00 28. 97
	atom	3888	CB	ARG	501	44. 641 -17. 780	39. 747	1. 00 37. 11
	atom	3889	CG	ARG	501	43. 168 -17. 454	39. 655	1. 00 39. 64
15	atom	3890	CD	ARG	501	42. 755 <i>-</i> 16. 596	40. 834	1. 00 51. 11
	atom	3891	NE	ARG	501	41. 304 -16. 451	40. 928	1. 00 56. 63
	atom	3892	CZ	ARG	501	40. 664 -16. 140	42. 048	1. 00 59. 94
	atom	3893	NH1	ARG	501	41. 360 -15. 942	43. 162	1. 00 60. 33
	atom	3894	NH2	ARG	501	39. 334 -16. 048	42. 059	1. 00 58. 22
20	atom	3895	С	ARG	501	46. 993 -17. 084	39. 359	1. 00 28. 69
	atom	3896	0	ARG	501	47. 698 -16. 119	39. 671	1. 00 26. 56
	atom	3897	N	HIS	502	47. 425 -18. 339	39 391	1. 00 25. 63
	atom	3898	CA	HIS	502	48. 770 -18. 675	39. 831	1. 00 28. 17
	atom	3899	CB	HIS	502	48. 879 -20. 202	40. 022	1. 00 31. 75
25	atom	3900	CG	HIS	502	48. 016 -20. 733	41. 133	1. 00 36. 89
	atom	3901	CD2	HIS	502	46. 691 -20. 583	41. 387	1. 00 40. 38
	atom	3902	ND1	HIS	502	48 . 513 −21. 507	42. 159	1. 00 32. 91
	atom	3903	CE1	HIS	502	47. 535 -21. 809	42. 995	1. 00 34. 77
	atom	3904	NE2	HIS	502	46. 419 -21. 262	42. 550	1. 00 35. 75
3 0	atom	3905	C	HIS	502	49. 858 -18. 148	38. 888	1. 00 27. 48
	atom	3906	0	HIS	502	50. 984 -17. 881	39. 306	1. 00 29. 54
	atom	3907	N	ARG	503	49. 540 -17. 997	37. 612	1. 00 30. 63
	atom	3908	CA	ARG	503	50. 531 -17. 470	36. 692	1. 00 29. 02
	atom	3909	CB	ARG	503	49. 992 -17. 498	35. 259	1. 00 29. 73
3 5	atom	3910	CG	ARG	503	50. 645 -18. 533	34. 351	1. 00 29. 98
	atom	3911	CD	ARG	503	49. 619 -19. 560	33. 919	1. 00 30. 05

	atom	3912	NE	ARG	503	50. 134 -20. 487	32. 927	1. 00 30. 15
	atom	3913	CZ	ARG	503	49. 764 -20. 485	31. 652	1. 00 33. 95
	atom	3914	NH1	ARG	503	48. 878 -19. 599	31. 222	1. 00 38. 59
	atom	3915	NH2	ARG	503	50. 262 -21. 376	30. 808	1. 00 32. 53
5	atom	3916	С	ARG	503	50. 807 -16. 033	37. 134	1. 00 28. 79
	atom	3917	0	ARG	503	51. 964 -15. 622	37. 248	1. 00 28. 60
	atom	3918	N	ALA	504	49. 732 -15. 284	37. 402	1. 00 30. 13
	atom	3919	CA	ALA	504	49. 833 -13. 880	37. 832	1. 00 29. 74
	atom	3920	CB	ALA	504	48. 439 -13. 224	37. 834	1. 00 28. 52
10	atom	3921	C	ALA	504	50. 513 -13. 701	39. 200	1. 00 26. 24
	atom	3922	0	ALA	504	51. 160 -12. 681	39. 436	1. 00 27. 81
	atom	3923	N	ARG	505	50. 353 -14. 676	40. 098	1. 00 28. 84
	atom	3924	CA	ARG	505	50. 995 -14. 634	41. 419	1. 00 27. 37
	atom	3925	CB	ARG	505	50. 813 -15. 971	42. 154	1. 00 28. 29
15	atom	3926	CG	ARG	505	50. 326 -15. 869	43. 598	1. 00 30. 58
	atom	3927	CD	ARG	505	49. 435 -17. 057	43. 992	1. 00 28. 65
	atom	3928	NE	ARG	505	48. 048 -16. 661	44. 262	1. 00 29. 11
	atom	3929	CZ	ARG	505	47. 034 -17. 515	44. 419	1. 00 30. 61
	atom	3930	NH1	ARG	505	47. 236 -18. 825	44. 334	1. 00 34. 91
20	atom	3931	NH2	ARG	505	45. 810 -17. 065	44. 661	1. 00 32. 55
	atom	3932	C	ARG	505	52. 475 -14. 410	41. 148	1. 00 26. 98
	atom	3933	0	ARG	505	53. 089 -13. 495	41. 697	1. 00 29. 63
	atom	3934	N	SER	506	53. 027 -15. 241	40. 265	1. 00 26. 48
	atom	3935	CA	SER	506	54. 432 <i>-</i> 15. 173	39. 884	1. 00 26. 79
25	atom	3936	CB	SER	506	54. 750 <i>-</i> 16. 256	38. 866	1. 00 28. 06
	atom	3937	0G	SER	506	56. 006 <i>-</i> 15. 995	38. 278	1. 00 33. 56
	atom	3938	С	SER	506	54. 889 -13. 831	39. 336	1. 00 28. 42
	atom	3939	0	SER	506	55. 780 <i>-</i> 13. 212	39. 912	1. 00 36. 05
	atom	3940	N	VAL	507	54. 292 -13. 374	38. 234	1. 00 25. 55
3 0	atom	3941	CA	VAL	507	54. 675 <i>-</i> 12. 090	37. 639	1. 00 20. 31
	atom	3942	CB	VAL	507	53. 732 -11. 674	36. 459	1. 00 24. 81
	atom	3943	CG1	VAL	507	54. 470 −10. 744	35. 515	1. 00 19. 95
	atom	3944	CG2	VAL	507	53. 214 <i>-</i> 12. 895	35. 722	1. 00 27. 87
	atom	3945	C	VAL	507	54. 659 <i>-</i> 10. 936	38. 640	1. 00 20. 26
3 5	atom	3946	0	VAL	507	55. 573 <i>-</i> 10. 094	38. 630	1. 00 18. 17
	atom	3947	N	ARG	508	53. 619 -10. 889	39. 483	1. 00 16. 63

```
40. 486
                                                                        1.00 20.36
                                            53. 476 -9. 826
      atom
              3948
                     CA ARG
                                 508
                                            52. 234 -10. 048
                                                               41. 358
                                                                        1. 00 22. 81
                     CB
                         ARG
                                 508
      atom
              3949
                                                     -9. 227
                                                               42. 625
                                                                        1. 00 21. 60
                     CG
                         ARG
                                 508
                                            52. 235
      atom
              3950
                                                               43. 477
                                                                        1. 00 28. 22
      atom
              3951
                     CD
                         ARG
                                 508
                                            50. 998
                                                     -9. 475
                                            51. 296
                                                     -9. 361
                                                               44. 911
                                                                        1. 00 37. 21
              3952
                     NE
                         ARG
                                 508
 5
      atom
                         ARG
                                            50. 847
                                                     -8.379
                                                               45. 689
                                                                        1.00 38.38
              3953
                     CZ
                                 508
      atom
                                                     -7. 423
                                                               45. 175
                                                                        1. 00 46. 52
              3954
                     NH1 ARG
                                 508
                                            50. 076
      atom
                                                                        1. 00 28. 71
                                                     -8.339
                                                               46. 972
              3955
                     NH2 ARG
                                 508
                                            51. 169
      atom
                                                     -9. 723
                                                               41. 383
                                                                        1. 00 22. 41
              3956
                     C
                          ARG
                                 508
                                            54. 691
      atom
                                                     -8. 626
                                                               41. 671
                                                                        1. 00 22. 27
              3957
                     0
                          ARG
                                 508
                                            55. 154
10
      atom
                                            55. 208 -10. 866
                                                               41.829
                                                                        1. 00 24. 91
              3958
                          ALA
                                 509
                     N
      atom
                                 509
                                            56. 389 -10. 855
                                                               42. 687
                                                                        1. 00 27. 02
              3959
                     CA
                          ALA
      atom
                                                                        1. 00 22. 60
                                            56. 740 -12. 276
                                                               43. 144
              3960
                     CB
                          ALA
                                 509
      atom
                                                               41. 932
                                                                        1. 00 28. 45
                     C
                                 509
                                            57. 560 -10. 234
              3961
                          ALA
      atom
                                 509
                                            58. 210 -9. 320
                                                               42. 436
                                                                        1. 00 32. 34
      atom
              3962
                     0
                          ALA
15
                                            57. 829 -10. 722
                                                                        1.00 29.56
                          ARG
                                 510
                                                               40. 724
      atom
              3963
                     N
                                            58. 928 -10. 180
                                                               39. 924
                                                                        1.00 30.26
                          ARG
                                 510
              3964
                     CA
      atom
                                                               38. 562
                                                                        1. 00 30. 46
              3965
                     CB
                          ARG
                                 510
                                            58. 978 -10. 870
      atom
                                                                        1. 00 25. 33
                                            58. 777 -12. 369
                                                               38. 607
                          ARG
                                 510
      atom
              3966
                     CG
                                            60.069 -13.055
                                                               38. 961
                                                                        1. 00 28. 12
                          ARG
                                 510
              3967
                     CD
20
      atom
                                                                         1.00 35.39
      atom
              3968
                     NE
                          ARG
                                 510
                                            59. 879 -14. 419
                                                               39. 451
                                                                        1. 00 34. 87
              3969
                     CZ
                          ARG
                                 510
                                            60. 226 -14. 836
                                                               40. 667
      atom
              3970
                     NH1 ARG
                                 510
                                            60. 784 -13. 999
                                                               41. 539
                                                                        1. 00 33. 89
      atom
                                                               41.001
                                                                         1. 00 36. 28
                                            60. 048 -16. 105
      atom
              3971
                     NH2 ARG
                                 510
                                                               39. 729
                                                                        1. 00 32. 22
                                            58. 746 -8. 670
              3972
                     C
                          ARG
                                 510
      atom
25
                                                                         1. 00 34. 67
              3973
                     0
                          ARG
                                 510
                                            59. 712
                                                      -7.909
                                                               39. 697
      atom
                                                               39. 602
                                                                         1. 00 33. 14
                          LEU
                                 511
                                            57. 497
                                                      -8. 234
      atom
              3974
                     N
                                                               39. 424
                                                                         1. 00 32. 24
              3975
                     CA
                          LEU
                                 511
                                            57. 211
                                                      -6. 812
      atom
                                                      -6. 617
                                                               38. 985
                                                                         1. 00 31. 16
              3976
                     CB
                          LEU
                                 511
                                            55. 755
      atom
                                                      -6. 888
                                                               37. 492
                                                                         1. 00 30. 87
              3977
                     CG
                          LEU
                                 511
                                            55. 532
3 0
      atom
                                                               37. 266
                                                                         1. 00 19. 45
                     CD1 LEU
                                 511
                                            54. 132
                                                      -7.401
              3978
      atom
                     CD2 LEU
                                                                         1. 00 25. 52
              3979
                                 511
                                            55. 787
                                                      -5. 611
                                                               36. 708
      atom
                                                               40. 701
                                                                         1. 00 31. 18
                                 511
                                            57. 479
                                                      -6. 017
      atom
              3980
                     C
                          LEU
                                                               40.669
                                                                         1. 00 26. 79
              3981
                     0
                          LEU
                                 511
                                            58. 169
                                                      -4. 989
      atom
                                                      -6.493
                                                               41.819
                                                                         1. 00 30. 24
               3982
                     N
                          LEU
                                 512
                                            56. 928
35
      atom
                                                               43. 108
                                                                         1. 00 32. 29
                     CA
                          LEU
                                 512
                                            57. 110
                                                      -5. 819
      atom
               3983
```

	atom	3984	СВ	LEU	512	56. 482	-6. 619	44. 261	1. 00 25. 88
	atom	3985	CG	LEU	512	54. 984	-6. 940	44. 299	1. 00 26. 51
	atom	3986	CD1	LEU	512	54. 716	-7. 891	45. 457	1. 00 28. 99
	atom	3987	CD2	LEU	512	54. 165	-5. 677	44. 444	1. 00 24. 37
5	atom	3988	C	LEU	512	58. 594	-5. 676	43. 402	1. 00 33. 82
	atom	3989	0	LEU	512	59. 094	-4. 580	43. 661	1. 00 33. 78
	atom	3990	N	SER	513	59. 289	-6. 803	43. 335	1. 00 34. 94
	atom	3991	CA	SER	513	60. 711	-6. 866	43. 630	1. 00 37. 95
	atom	3992	CB	SER	513	61. 138	-8. 332	43. 650	1. 00 42. 15
10	atom	3993	0G	SER	513	60. 281	-9. 073	44. 514	1. 00 45. 41
	atom	3994	C	SER	513	61. 644	-6. 046	42. 743	1. 00 36. 68
	atom	3995	0	SER	513	62. 864	-6. 162	42. 849	1. 00 35. 08
	atom	3996	N	GLN	514	61. 067	-5. 206	41. 891	1. 00 37. 16
	atom	3997	CA	GLN	514	61. 836	-4. 358	40. 983	1. 00 37. 50
15	atom	3998	CB	GLN	514	61. 248	-4. 429	39. 569	1. 00 43. 16
	atom	3999	CG	GLN	514	61. 986	-5. 334	38. 574	1. 00 46. 16
	atom	4000	CD	GLN	514	61. 951	-4. 784	37. 144	1. 00 48. 42
	atom	4001	0E1	GLN	514	61. 409	-3. 700	36. 886	1. 00 45. 55
	atom	4002	NE2	GLN	514	62. 535	-5. 531	36. 211	1. 00 43. 64
20	atom	4003	C	GLN	514	61. 753	-2. 922	41. 483	1. 00 37. 67
	atom	4004	0	GLN	514	62. 463	-2. 039	41. 007	1. 00 35. 72
	atom	4005	N	GLY	515	60. 865	-2. 697	42. 446	1. 00 38. 87
	atom	4006	CA	GLY	515	60. 689	-1. 370	43. 007	1. 00 36. 83
	atom	4007	C	GLY	515	60. 157	-0. 355	42. 012	1. 00 36. 39
25	atom	4008	0	GLY	515	60. 024	-0. 650	40. 827	1. 00 37. 60
	atom	4009	N	GLY	516	59. 841	0. 839	42. 505	1. 00 33. 81
	atom	4010	CA	GLY	516	59. 334	1. 897	41. 655	1. 00 33. 91
	atom	4011	C	GLY	516	58. 143	1. 533	40. 794	1. 00 38. 28
	atom	4012	0	GLY	516	57. 298	0. 722	41. 181	1. 00 38. 92
3 0	atom	4013	N	ARG	517	58. 091	2. 144	39. 614	1. 00 38. 05
	atom	4014	CA	ARG	517	57. 012	1. 934	38. 659	1. 00 35. 86
	atom	4015	CB	ARG	517	57. 396	2. 537	37. 305	1. 00 40. 10
	atom	4016	CG	ARG	517	56. 812	3. 919	37. 054	1. 00 43. 18
	atom	4017	CD	ARG	517	56. 079	3. 950	35. 735	1. 00 47. 23
3 5	atom	4018	NE	ARG	517	56. 470	5. 105	34. 939	1. 00 54. 17
	atom	4019	CZ	ARG	517	57. 512	5. 130	34. 112	1. 00 56. 95

				_					
	atom	4020	NH1		517	58. 279	4. 056	33. 965	1. 00 58. 23
	atom	4021	NH2	ARG	517	57. 794	6. 237	33. 436	1. 00 58. 13
	atom	4022	С	ARG	517	56. 605	0. 476	38. 477	1. 00 31. 56
	atom	4023	0	ARG	517	55. 414	0. 160	38. 475	1. 00 34. 95
5	atom	4024	N	ALA	518	57. 573	-0. 419	38. 328	1. 00 25. 19
	atom	4025	CA	ALA	518	57. 228	-1. 825	38. 150	1. 00 21. 50
	atom	4026	CB	ALA	518	58. 457	-2. 630	37. 885	1. 00 11. 56
	atom	4027	C	ALA	518	56. 480	-2. 398	39. 347	1. 00 22. 19
	atom	4028	0	ALA	518	55. 663	-3. 305	39. 193	1. 00 26. 95
10	atom	4029	N	ALA	519	56. 768	-1. 867	40. 534	1. 00 22. 61
	atom	4030	CA	ALA	519	56. 138	-2. 303	41. 782	1. 00 19. 97
	atom	4031	CB	ALA	519	56. 867	-1. 669	42. 975	1. 00 17. 81
	atom	4032	С	ALA	519	54. 656	-1. 938	41. 828	1. 00 20. 24
	atom	4033	0	ALA	519	53. 810	-2. 760	42. 207	1. 00 19. 71
15	atom	4034	N	THR	520	54. 346	-0. 697	41. 453	1. 00 19. 16
	atom	4035	CA	THR	520	52. 968	-0. 221	41. 453	1. 00 21. 36
	atom	4036	CB	THR	520	52. 907	1. 225	40. 977	1. 00 20. 09
	atom	4037	0G1	THR	520	53. 970	1. 952	41. 595	1. 00 23. 76
	atom	4038	CG2	THR	520	51. 582	1. 868	41. 356	1. 00 18. 61
2 0	atom	4039	С	THR	520	52. 059	-1. 092	40. 574	1. 00 24. 98
	atom	4040	0	THR	520	50. 947	-1. 434	40. 984	1. 00 25. 03
	atom	4041	N	CYS	521	52. 541	-1. 451	39. 377	1. 00 23. 25
	atom	4042	CA	CYS	521	51. 785	-2. 288	38. 431	1. 00 21. 68
	atom	4043	CB	CYS	521	52. 573	-2. 510	37. 118	1. 00 21. 82
25	atom	4044	SG	CYS	521	52. 914	-1. 044	36. 097	1. 00 17. 89
	atom	4045	С	CYS	521	51. 504	-3. 643	39. 054	1. 00 20. 51
	atom	4046	0	CYS	521	50. 398	-4. 168	38. 959	1. 00 19. 81
	atom	4047	N	GLY	522	52. 529	-4. 206	39. 683	1. 00 21. 73
	atom	4048	CA	GLY	522	52. 404	-5. 504	40. 317	1. 00 21. 72
3 0	atom	4049	C	GLY	522	51. 402	-5. 544	41. 453	1. 00 23. 41
	atom	4050	0	GLY	522	50. 619	-6. 497	41. 589	1. 00 22. 54
	atom	4051	N	LYS	523	51. 405	-4. 492	42. 256	1. 00 21. 41
	atom	4052	CA	LYS	523	50. 527	-4. 425	43. 406	1. 00 21. 80
	atom	4053	CB	LYS	523	51. 148	-3. 442	44. 416	1. 00 22. 06
3 5	atom	4054	CG	LYS	523	50. 178	-2. 735	45. 320	1. 00 22. 90
	atom	4055	CD	LYS	523	50. 911	-1. 834	46. 293	1. 00 21. 46

```
-0.961
                                                               47. 083
                                                                         1. 00 13. 21
                          LYS
                                 523
                                            49. 933
      atom
              4056
                     CE
                     NZ
                          LYS
                                 523
                                            50.606
                                                       0. 324
                                                               47. 409
                                                                         1. 00 23. 93
              4057
      atom
                     C
                          LYS
                                 523
                                            49. 087
                                                     -4.048
                                                               43. 023
                                                                         1. 00 22. 07
              4058
      atom
                          LYS
                                            48. 112
                                                     -4.609
                                                               43. 533
                                                                         1. 00 21. 31
      atom
              4059
                     0
                                 523
                          TYR
                                 524
                                            48. 951
                                                     −3. 117
                                                               42. 093
                                                                         1. 00 23. 53
              4060
                     N
      atom
 5
                          TYR
                                  524
                                            47. 624
                                                     -2.692
                                                               41.678
                                                                         1. 00 24. 18
              4061
                     CA
      atom
                          TYR
                                            47. 707
                                                      -1. 248
                                                               41. 170
                                                                         1. 00 26. 96
      atom
              4062
                     CB
                                  524
                                                     -0.222
                                                               42. 292
                                                                         1. 00 31. 99
                     CG
                          TYR
                                  524
                                            47. 799
              4063
      atom
                     CD1 TYR
                                  524
                                            49. 028
                                                       0. 147
                                                               42. 835
                                                                         1. 00 31. 39
      atom
              4064
                     CE1 TYR
                                  524
                                            49. 108
                                                       1. 041
                                                               43. 892
                                                                         1. 00 31. 53
      atom
              4065
10
                                                               42. 832
                                                                         1.00 36.34
                     CD2 TYR
                                  524
                                            46. 653
                                                       0. 343
              4066
      atom
              4067
                     CE2 TYR
                                  524
                                            46. 720
                                                       1. 238
                                                               43. 891
                                                                         1. 00 35. 33
      atom
                                                               44. 417
                                                                         1.00 34.86
                     CZ
                          TYR
                                  524
                                            47. 943
                                                       1. 585
      atom
              4068
                                                                         1. 00 30. 70
                          TYR
                                  524
                                            47. 983
                                                       2.452
                                                               45. 486
              4069
                     OH
      atom
              4070
                     C
                          TYR
                                  524
                                            46. 958
                                                      -3.618
                                                               40. 629
                                                                         1. 00 25. 33
      atom
15
                                                      -4.043
                                                               40. 792
                                                                         1. 00 22. 85
              4071
                     0
                          TYR
                                  524
                                            45. 806
      atom
                          LEU
                                  525
                                            47. 686
                                                      -3.956
                                                               39. 570
                                                                         1. 00 20. 76
              4072
                     N
      atom
                                            47. 109
                                                      -4.787
                                                               38. 539
                                                                         1. 00 19. 46
      atom
              4073
                     CA
                          LEU
                                  525
                                                      -4.766
                                                               37. 252
                                                                         1. 00 20. 85
                     CB
                          LEU
                                  525
                                            47. 957
              4074
      atom
                     CG
                          LEU
                                  525
                                            48. 736
                                                      -3.549
                                                               36. 746
                                                                         1. 00 18. 37
              4075
20
      atom
                     CD1 LEU
                                            49. 208
                                                      -3.846
                                                               35. 334
                                                                         1. 00 19. 62
      atom
              4076
                                  525
                     CD2 LEU
                                            47. 869
                                                      -2.316
                                                               36. 731
                                                                         1. 00 23. 39
              4077
                                  525
      atom
              4078
                     C
                          LEU
                                  525
                                            46. 930
                                                      -6. 227
                                                               38. 957
                                                                         1. 00 19. 55
      atom
                                                                         1. 00 14. 61
                                  525
                                                      -6.908
                                                               38. 443
              4079
                     0
                          LEU
                                            46. 037
      atom
                                  526
                                                      -6.710
                                                               39.879
                                                                         1. 00 21. 79
              4080
                      N
                          PHE
                                            47. 759
      atom
25
                                                               40. 239
                                                                         1. 00 22. 87
              4081
                      CA
                          PHE
                                  526
                                            47. 660
                                                      -8. 129
      atom
                                                                         1. 00 23. 31
                          PHE
                                  526
                                            48. 976
                                                      -8. 848
                                                               39. 882
               4082
                      CB
      atom
                          PHE
                                  526
                                            49. 394
                                                      -8. 686
                                                               38. 425
                                                                         1. 00 25. 42
      atom
              4083
                      CG
               4084
                      CD1 PHE
                                  526
                                            50. 444
                                                      -7. 836
                                                               38. 070
                                                                         1. 00 25. 95
      atom
                                                      -9.382
                                                               37. 412
                                                                         1. 00 22. 77
                      CD2 PHE
                                  526
                                            48. 741
      atom
               4085
30
                      CE1 PHE
                                  526
                                             50.830
                                                      -7.690
                                                               36. 723
                                                                         1.00 25.73
               4086
      atom
                      CE2 PHE
                                                      -9.233
                                                               36. 054
                                                                         1. 00 19. 20
      atom
               4087
                                  526
                                            49. 129
                                                                         1. 00 12. 30
                      CZ
                           PHE
                                  526
                                             50. 166
                                                      -8.394
                                                               35. 716
               4088
      atom
                                  526
                                            47. 230
                                                      -8. 493
                                                               41. 645
                                                                         1. 00 19. 74
               4089
                      C
                           PHE
      atom
                           PHE
                                  526
                                            47. 406
                                                      -9. 626
                                                               42. 077
                                                                         1. 00 20. 87
35
      atom
               4090
                      0
                                                                         1.00 20.80
                           ASN
                                  527
                                             46. 649
                                                      -7.540
                                                               42. 351
               4091
                      N
      atom
```

```
-7.800
                                                              43. 697
                                                                        1. 00 22. 67
                         ASN
                                 527
                                            46. 168
      atom
              4092
                     CA
                                                                        1.00 21.32
                         ASN
                                            45. 676
                                                     -6.503
                                                              44. 329
              4093
                     CB
                                 527
      atom
                         ASN
                                 527
                                            45. 875
                                                     -6.480
                                                               45. 820
                                                                        1. 00 27. 69
              4094
                     CG
      atom
                                                                        1. 00 26. 48
                                            47.001
                                                     -6. 622
                                                               46. 320
      atom
              4095
                     OD1 ASN
                                 527
                     ND2 ASN
                                            44. 786
                                                     -6.298
                                                               46. 550
                                                                        1. 00 22. 52
              4096
                                 527
 5
      atom
                     C
                          ASN
                                 527
                                            45. 025
                                                     -8.824
                                                               43.661
                                                                        1. 00 26. 89
              4097
      atom
                                                                        1.00 29.14
                          ASN
                                            44. 758
                                                     -9.504
                                                               44. 654
      atom
              4098
                     0
                                 527
                                                               42. 509
                                                                        1.00 26.74
                          TRP
                                 528
                                            44. 360
                                                     -8. 933
              4099
                     N
      atom
                         TRP
                                            43. 245
                                                     -9. 863
                                                               42. 334
                                                                        1. 00 22. 63
      atom
              4100
                     CA
                                 528
                     CB
                          TRP
                                 528
                                            42. 511
                                                     -9.588
                                                               40. 999
                                                                        1. 00 23. 42
10
      atom
              4101
                                                                        1.00 22.88
                     CG
                         TRP
                                 528
                                            43. 373
                                                     -9. 841
                                                               39. 769
              4102
      atom
              4103
                     CD2 TRP
                                 528
                                            43. 737 -11. 119
                                                               39. 226
                                                                        1.00 16.34
      atom
                                                               38. 224
                                                                        1.00 16.94
                     CE2 TRP
                                 528
                                            44. 716 ~10. 891
      atom
              4104
                                                               39. 493
                                                                        1. 00 16. 31
                     CE3 TRP
                                 528
                                            43. 341 -12. 430
              4105
      atom
              4106
                     CD1 TRP
                                 528
                                            44. 109 -8. 909
                                                               39. 074
                                                                        1. 00 21. 03
15
      atom
                                                               38. 151
                                                                        1. 00 20. 51
              4107
                     NE1 TRP
                                 528
                                            44. 920 -9. 533
      atom
                     CZ2 TRP
                                 528
                                            45. 307 -11. 930
                                                               37. 491
                                                                        1. 00 12. 66
              4108
      atom
                     CZ3 TRP
                                            43. 935 -13. 478
                                                               38. 757
                                                                        1. 00 22. 18
      atom
              4109
                                 528
                                            44. 908 -13. 214
                                                               37. 770
                                                                        1. 00 10. 51
                     CH2 TRP
                                 528
              4110
      atom
                     C
                          TRP
                                 528
                                            43. 770 -11. 295
                                                               42. 350
                                                                        1. 00 24. 25
              4111
20
      atom
                                                                        1. 00 20. 16
                          TRP
                                            43. 006 -12. 246
                                                               42. 533
      atom
              4112
                     0
                                 528
                                            45. 081 -11. 444
                                                               42. 172
                                                                        1. 00 27. 26
              4113
                     N
                          ALA
                                 529
      atom
              4114
                     CA
                          ALA
                                 529
                                            45. 700 -12. 772
                                                               42. 137
                                                                        1. 00 28. 52
      atom
                                 529
                                            46. 966 -12. 742
                                                               41. 293
                                                                        1. 00 19. 41
                     CB
                          ALA
      atom
              4115
                                 529
                                            46. 023 -13. 306
                                                               43. 523
                                                                        1. 00 30. 29
                     C
                          ALA
      atom
              4116
25
                                                               43.861
                                                                        1. 00 35. 11
              4117
                     0
                          ALA
                                 529
                                            45. 648 -14. 427
      atom
                                                                        1. 00 33. 55
                                 530
                                            46. 725 -12. 507
                                                               44. 317
              4118
                     N
                          VAL
      atom
                                 530
                                            47. 103 -12. 910
                                                               45. 670
                                                                        1. 00 33. 91
              4119
                     CA
                          VAL
      atom
              4120
                     CB
                          VAL
                                 530
                                            47. 857 -11. 769
                                                               46. 412
                                                                        1. 00 31. 28
      atom
                                                               45. 464
                                                                         1. 00 26. 39
              4121
                     CG1 VAL
                                 530
                                            48. 789 -11. 047
      atom
30
              4122
                     CG2 VAL
                                 530
                                            46. 874 -10. 791
                                                               47. 004
                                                                        1. 00 29. 38
      atom
                                            45. 875 -13. 319
                                                               46. 486
                                                                         1. 00 36. 28
              4123
                     C
                          VAL
                                 530
      atom
                                                               46. 236
                                                                         1. 00 38. 88
                                 530
                                            44. 759 -12. 853
              4124
                     0
                          VAL
      atom
                                            46. 090 -14. 191
                                                               47. 465
                                                                         1. 00 38. 17
      atom
              4125
                     N
                          LYŞ
                                 531
              4126
                     CA
                          LYS
                                 531
                                            45. 017 -14. 687
                                                               48. 327
                                                                         1. 00 38. 07
35
      atom
                                                                         1. 00 39. 85
                     CB
                          LYS
                                 531
                                            45. 476 -15. 987
                                                               48. 995
               4127
      atom
```

```
46. 671 -16. 647
                                                               48. 300
                                                                        1.00 38.60
                         LYS
                                 531
      atom
              4128
                     CG
                         LYS
                                 531
                                           47. 946 -15. 836
                                                               48. 534
                                                                        1. 00 43. 75
              4129
                     CD
      atom
                          LYS
                                 531
                                            49. 106 -16. 300
                                                               47. 666
                                                                        1. 00 42. 42
              4130
                     CE
      atom
                                            49. 773 -17. 500
                                                               48. 247
                                                                        1. 00 43. 42
      atom
              4131
                     NZ
                          LYS
                                 531
                     C
                          LYS
                                 531
                                            44. 593 -13. 644
                                                               49. 378
                                                                        1. 00 36. 13
              4132
      atom
 5
                          LYS
                                 531
                                            43. 404 -13. 304
                                                               49. 494
                                                                        1. 00 36. 59
      atom
              4133
                     0
                          THR
                                            45. 560 -13. 142
                                                               50. 143
                                                                        1. 00 29. 06
      atom
              4134
                     N
                                 532
                                                               51. 142
                                                                        1. 00 26. 83
                          THR
                                 532
                                            45. 271 -12. 122
              4135
                     CA
      atom
                          THR
                                 532
                                            46. 183 -12. 237
                                                               52. 362
                                                                        1. 00 27. 27
      atom
              4136
                     CB
                     OG1 THR
                                 532
                                            46. 813 -13. 520
                                                               52. 364
                                                                        1. 00 35. 92
10
      atom
              4137
                                                               53. 638
                                                                        1.00 26.98
                     CG2 THR
                                 532
                                            45. 371 -12. 051
              4138
      atom
                                                                        1. 00 23. 15
              4139
                     C
                          THR
                                 532
                                            45. 512 -10. 779
                                                               50. 479
      atom
                                                                        1.00 17.89
                          THR
                                 532
                                            46. 638 -10. 298
                                                               50. 392
      atom
              4140
                     0
                                                                        1. 00 24. 30
                          LYS
                                            44. 444 -10. 161
                                                               50.019
              4141
                     N
                                 533
      atom
              4142
                     CA
                          LYS
                                 533
                                            44. 610 -8. 915
                                                               49. 313
                                                                        1. 00 30. 02
15
      atom
                                                     -8.601
                                                                        1. 00 34. 16
              4143
                     CB
                          LYS
                                 533
                                            43. 330
                                                               48. 543
      atom
                          LYS
                                 533
                                            43. 261
                                                     -9.297
                                                               47. 186
                                                                        1. 00 42. 24
              4144
                     CG
      atom
                                                    -9. 901
                                                               46. 917
                                                                        1. 00 44. 15
      atom
              4145
                     CD
                          LYS
                                 533
                                            41. 884
                                                               46. 751
                                                                        1. 00 46. 89
                     CE
                          LYS
                                 533
                                            41. 955 -11. 415
              4146
      atom
                     NZ
                          LYS
                                 533
                                            41. 927 -11. 827
                                                               45. 328
                                                                        1. 00 43. 79
              4147
20
      atom
                          LYS
                                            44. 993
                                                     -7.746
                                                               50. 186
                                                                        1. 00 30. 92
      atom
              4148
                     C
                                 533
                          LYS
                                                     -7. 697
                                                               51. 363
                                                                        1. 00 34. 83
              4149
                     0
                                 533
                                            44. 629
      atom
              4150
                     N
                          LEU
                                 534
                                            45. 748
                                                     -6.809
                                                               49. 613
                                                                        1. 00 32. 89
      atom
                          LEU
                                            46. 119
                                                     -5. 607
                                                               50. 338
                                                                        1. 00 32. 08
                     CA
                                 534
      atom
              4151
                                                     -5.142
                                                               49. 986
                                                                        1. 00 30. 92
              4152
                     CB
                          LEU
                                 534
                                            47. 526
      atom
25
                                                               48.608
                                                                        1. 00 35. 03
              4153
                     CG
                          LEU
                                 534
                                            48. 112
                                                     -5. 387
      atom
                     CD1 LEU
                                            47. 865
                                                     -4. 160
                                                               47. 762
                                                                        1. 00 33. 89
              4154
                                 534
      atom
                     CD2 LEU
                                                               48. 725
                                                                        1. 00 32. 33
      atom
              4155
                                 534
                                            49. 621
                                                     -5. 677
              4156
                          LEU
                                 534
                                            45. 101
                                                     -4.549
                                                               49. 960
                                                                        1. 00 34. 40
      atom
                     C
                                                                        1. 00 34. 91
                          LEU
                                 534
                                            44. 462
                                                     -4.653
                                                               48. 919
30
      atom
              4157
                     0
                     N
                          LYS
                                 535
                                            44. 925
                                                     -3.551
                                                               50. 824
                                                                        1.00 37.40
              4158
      atom
                                                               50. 580
                                                                        1. 00 34. 10
      atom
              4159
                     CA
                          LYS
                                 535
                                            43. 961
                                                     -2.480
                                                                        1. 00 36. 92
                     CB
                          LYS
                                 535
                                            43. 499
                                                     -1. 866
                                                               51. 911
              4160
      atom
                                                     -1. 841
                                                               52. 114
                                                                        1. 00 38. 59
              4161
                     CG
                          LYS
                                 535
                                            41. 986
      atom
                     CD
                          LYS
                                 535
                                            41. 402
                                                     -0.439
                                                               51.877
                                                                        1. 00 44. 81
35
      atom
              4162
                     CE
                                 535
                                            41. 745
                                                       0. 537
                                                               53. 041
                                                                         1. 00 48. 73
              4163
                          LYS
      atom
```

	atom	4164	NZ	LYS	535	41. 791	2. 007	52. 687	1. 00 35. 50
	atom	4165	С	LYS	535	44. 569	-1. 399	49. 695	1. 00 33. 67
	atom	4166	0	LYS	535	45. 465	-0. 651	50. 111	1. 00 33. 50
	atom	4167	N	LEU	536	44. 062	-1. 302	48. 475	1. 00 31. 05
5	atom	4168	CA	LEU	536	44. 574	-0. 317	47. 536	1. 00 28. 88
	atom	4169	CB	LEU	536	44. 148	-0. 686	46. 120	1. 00 20. 05
	atom	4170	CG	LEU	536	44. 814	-2. 001	45. 746	1. 00 17. 34
	atom	4171	CD1	LEU	536	44. 447	-2. 418	44. 336	1. 00 14. 63
	atom	4172	CD2	LEU	536	46. 316	-1. 828	45. 895	1. 00 16. 21
10	atom	4173	C	LEU	536	44. 157	1. 104	47. 866	1. 00 29. 61
	atom	4174	0	LEU	536	42. 984	1. 383	48. 100	1. 00 29. 85
	atom	4175	N	THR	537	45. 148	1. 987	47. 916	1. 00 28. 82
	atom	4176	CA	THR	537	44. 927	3. 396	48. 186	1. 00 30. 68
	atom	4177	CB	THR	537	46. 005	3. 978	49. 116	1. 00 34. 05
15	atom	4178	0G1	THR	537	47. 102	4. 463	48. 325	1. 00 37. 16
	atom	4179	CG2	THR	537	46. 505	2. 923	50. 095	1. 00 37. 83
	atom	4180	C	THR	537	45. 055	4. 086	46. 833	1. 00 31. 45
	atom	4181	0	THR	537	45. 804	3. 629	45. 972	1. 00 30. 15
	atom	4182	N	PR0	538	44. 314	5. 176	46. 617	1. 00 29. 13
20	atom	4183	CD	PR0	538	43. 325	5. 821	47. 497	1. 00 30. 93
	atom	4184	CA	PR0	538	44. 434	5. 844	45. 321	1. 00 29. 71
	atom	4185	CB	PRO	538	43. 652	7. 135	45. 511	1. 00 31. 77
	atom	4186	CG	PR0	538	42. 634	6. 788	46. 578	1. 00 32. 13
	atom	4187	С	PR0	538	45. 900	6. 075	44. 973	1. 00 30. 50
25	atom	4188	0	PR0	538	46. 692	6. 472	45. 831	1. 00 29. 48
	atom	4189	N	ILE	539	46. 257	5. 796	43. 719	1. 00 28. 66
	atom	4190	CA	ILE	539	47. 626	5. 955	43. 261	1. 00 30. 89
	atom	4191	CB	ILE	539	47. 843		41. 855	1. 00 32. 12
	atom	4192		ILE	539	49. 236	5. 640	41. 357	1. 00 23. 73
3 0	atom	4193	CG1	ILE	539	47. 669		41. 922	1. 00 33. 30
	atom	4194	CD1	ILE	539	47. 241		40. 605	1. 00 32. 29
	atom	4195	C	ILE	539	47. 978	7. 425	43. 212	1. 00 35. 32
	atom	4196	0	ILE	539	47. 301	8. 217	42. 561	1. 00 36. 86
	atom	4197	N	PRO	540	49. 040	7. 810	43. 923	1. 00 42. 57
3 5	atom	4198	CD	PR0	540	49. 869	6. 899	44. 735	1. 00 45. 45
	atom	4199	CA	PR0	540	49. 500	9. 203	43. 973	1. 00 47. 52

	atom	4200	CB	PR0	540	50. 494	9. 224	45. 134	1. 00 47. 95
	atom	4201	CG	PRO	540	50. 913	7. 798	45. 335	1. 00 46. 55
	atom	4202	C	PR0	540	50. 135	9. 671	42. 667	1. 00 51. 52
	atom	4203	0	PR0	540	49. 905	10. 793	42. 228	1. 00 52. 60
5	atom	4204	N	ALA	541	50. 937	8. 810	42. 053	1. 00 53. 79
	atom	4205	CA	ALA	541	51. 592	9. 151	40. 797	1. 00 58. 44
	atom	4206	CB	ALA	541	52. 733	8. 168	40. 535	1. 00 61. 73
	atom	4207	C	ALA	541	50. 600	9. 147	39. 621	1. 00 60. 41
	atom	4208	0	ALA	541	50. 855	8. 529	38. 582	1. 00 58. 45
10	atom	4209	N	ALA	542	49. 473	9. 839	39. 793	1. 00 62. 52
	atom	4210	CA	ALA	542	48. 433	9. 920	38. 766	1. 00 62. 72
	atom	4211	CB	ALA	542	47. 760	8. 558	38. 601	1. 00 64. 28
	atom	4212	С	ALA	542	47. 384	10. 967	39. 142	1. 00 64. 21
	atom	4213	0	ALA	542	46. 574	10. 739	40. 046	1. 00 64. 50
15	atom	4214	N	SER	543	47. 391	12. 105	38. 450	1. 00 64. 02
	atom	4215	CA	SER	543	46. 428	13. 173	38. 725	1. 00 61. 74
	atom	4216	CB	SER	543	46. 552	13. 643	40. 180	1. 00 60. 37
	atom	4217	0G	SER	543	45. 414	13. 287	40. 952	1. 00 56. 95
	atom	4218	С	SER	543	46. 654	14. 352	37. 788	1. 00 61. 94
2 0	atom	4219	0	SER	543	47. 593	14. 261	36. 965	1. 00 63. 12
	atom	4220	CB	LEU	547	43. 716	10. 598	30. 109	1. 00 46. 53
	atom	4221	CG	LEU	547	44. 915	9. 938	30. 813	1. 00 41. 86
	atom	4222	CD1	LEU	547	44. 610	8. 464	31. 097	1. 00 39. 82
	atom	4223		LEU	547	46. 162	10. 064	29. 939	1. 00 40. 47
25	atom	4224	С	LEU	547	42. 571	12. 609	29. 095	1. 00 50. 18
	atom	4225	0	LEU	547	41. 655			1. 00 53. 79
	atom	4226	N	LEU	547	44. 121	12. 899	30. 947	1. 00 47. 33
	atom	4227	CA	LEU	547	43. 855	12. 084	29. 729	1. 00 50. 02
	atom	4228	N	SER	548	42. 516	13. 923	28. 930	1. 00 51. 66
3 0	atom	4229	CA	SER	548	41. 354	14. 582	28. 350	1. 00 52. 11
	atom	4230	CB	SER	548	41. 366	16. 070	28. 731	1. 00 53. 79
	atom	4231	0G	SER	548	42. 546	16. 705	28. 255	1. 00 56. 74
	atom	4232	C	SER	548	41. 320	14. 440		1. 00 50. 14
	atom	4233	0	SER	548	40. 273	14. 124	26. 250	1. 00 47. 18
3 5	atom	4234	N	GLY	549	42. 472	14. 666	26. 185	1. 00 47. 75
	atom	4235	CA	GLY	549	42. 576	14. 589	24. 733	1. 00 46. 46

	atom	4236	С	GLY	549	42. 238	13. 259	24. 083	1. 00 43. 60
	atom	4237	0	GLY	549	41. 764	13. 209	22. 947	1. 00 45. 49
	atom	4238	N	TRP	550	42. 472	12. 183	24. 819	1. 00 40. 58
	atom	4239	CA	TRP	550	42. 230	10. 830	24. 349	1. 00 37. 12
5	atom	4240	СВ	TRP	550	42. 491	9. 850	25. 479	1. 00 33. 40
	atom	4241	CG	TRP	550	43. 931	9. 703	25. 814	1. 00 39. 27
	atom	4242	CD2	TRP	550	44. 542	8. 594	26. 472	1. 00 38. 11
	atom	4243	CE2	TRP	550	45. 913	8. 884	26. 586	1. 00 39. 99
	atom	4244	CE3	TRP	550	44. 060	7. 385	26. 985	1. 00 40. 66
10	atom	4245	CD1	TRP	550	44. 928	10. 594	25. 557	1. 00 38. 74
	atom	4246	NE1	TRP	550	46. 122	10. 111	26. 013	1. 00 39. 45
	atom	4247	CZ2	TRP	550	46. 814	8. 004	27. 177	1. 00 39. 82
	atom	4248	CZ3	TRP	550	44. 950	6. 513	27. 571	1. 00 41. 68
	atom	4249	CH2	TRP	550	46. 315	6. 829	27. 669	1. 00 40. 92
15	atom	4250	C	TRP	550	40. 821	10. 610	23. 850	1. 00 37. 72
	atom	4251	0	TRP	550	40. 592	9. 901	22. 854	1. 00 36. 59
	atom	4252	N	PHE	551	39. 877	11. 218	24. 555	1. 00 36. 18
	atom	4253	CA	PHE	551	38. 480	11. 055	24. 225	1. 00 33. 96
	atom	4254	CB	PHE	551	37. 799	10. 321	25. 371	1. 00 30. 39
20	atom	4255	CG	PHE	551	38. 513	9. 055	25. 777	1. 00 25. 23
	atom	4256	CD1	PHE	551	39. 427	9. 054	26. 826	1. 00 27. 56
	atom	4257	CD2	PHE	551	38. 266	7. 857	25. 115	1. 00 27. 89
	atom	4258		PHE	551	40. 091	7. 860	27. 216	1. 00 24. 35
	atom	4259		PHE	551	38. 920	6. 656	25. 492	1. 00 19. 97
25	atom	4260	CZ	PHE	551	39. 828	6. 664	26. 541	1. 00 22. 33
	atom	4261	C	PHE	551	37. 791	12. 370	23. 892	1. 00 35. 69
	atom	4262	0	PHE	551	36. 898	12. 843	24. 607	1. 00 35. 41
	atom	4263	N	VAL	552	38. 232	12. 935	22. 770	1. 00 32. 09
	atom	4264	CA	VAL	552	37. 725	14. 186	22. 237	1. 00 29. 85
3 0	atom	4265	CB	VAL	552	38. 901	15. 090	21. 838	1. 00 31. 14
	atom	4266		VAL	552	38. 469	16. 069	20. 772	1. 00 29. 68
	atom	4267		VAL	552	39. 442	15. 809	23. 065	1. 00 28. 42
	atom	4268	C	VAL	552	36. 854	13. 902	20. 998	1. 00 27. 42
	atom	4269	0	VAL	552	35. 723	14. 361	20. 902	1. 00 27. 21
3 5	atom	4270	N	ALA	553	37. 394	13. 130	20. 065	1. 00 24. 42
	atom	4271	CA	ALA	553	36. 697	12. 783	18. 829	1. 00 23. 14

	atom	4272	СВ	ALA	553	36. 9	902	13.	877	17.	785	1. 00	18. 35)
	atom	4273	С	ALA	553	37. 2	228	11.	468	18.	280	1. 00	20. 69)
	atom	4274	0	ALA	553	38. 2	277	10.	987	18.	709	1. 00	18. 72	<u>)</u>
	atom	4275	N	GLY	554	36. 4	197	10.	897	17.	328	1. 00	18. 56	j
5	atom	4276	CA	GLY	554	36. 9	918	9.	657	16.	701	1. 00	15. 95	;
	atom	4277	С	GLY	554	37. 7	778	9.	988	15.	492	1. 00	19. 28	}
	atom	4278	0	GLY	554	37. 5	555	10.	992	14.	817	1. 00	17. 64	ļ
	atom	4279	N	TYR	555	38. 7	756	9.	138	15.	201	1. 00	22. 01	
•	atom	4280	CA	TYR	555	39. E	639	9.	399	14.	079	1. 00	24. 13	}
10	atom	4281	CB	TYR	555	40. 9	937	10.	005	14.	595	1. 00	20. 22) -
	atom	4282	CG	TYR	555	40. 7	748	11.	356	15.	221	1. 00	19. 94	ļ
	atom	4283	CD1	TYR	555	40. 7	759	11.	516	16.	607	1. 00	18. 14	l
	atom	4284	CE1	TYR	555	40. (695	12.	784	17.	180	1. 00	20. 60)
	atom	4285	CD2	TYR	555	40. E	651	12.	490	14.	427	1. 00	18. 09	}
15	atom	4286	CE2	TYR	555	40. 5	587	13.	747	14.	984	1. 00	18. 43	}
	atom	4287	CZ	TYR	555	40 . 6	622	13.	888	16.	351	1. 00	19.06	ì
	atom	4288	ОН	TYR	555	40 . 6	673	15.	148	16.	863	1. 00	24. 90)
	atom	4289	C	TYR	555	39. 9	985	8.	216	13.	197	1. 00	26. 88	}
	atom	4290	0	TYR	555	40. 9	916	8.	304	12.	400	1. 00	30. 02	<u> </u>
20	atom	4291	N	SER	556	39. 2	272	7.	106	13.	315	1. 00	30. 32	2
	atom	4292	CA	SER	556	39. (629	5.	978	12.	464	1. 00	37. 27	7
	atom	4293	CB	SER	556	38. 9	942	4.	690	12.	933	1. 00	37. 51	İ
	atom	4294	OG	SER	556	37. 5	535	4.	827	12.	988	1. 00	51. 44	1
	atom	4295	C	SER	556	39. 2	263	6.	293	11.	020	1. 00	37. 29	}
25	atom	4296	0	SER	556	38. (051	6.	322		719	1. 00	38. 86	ì
	atom	4297	OT	SER	556	40. 1	198	6.	526	10.	221		34. 94	-
	atom	4298	0	НОН	601	46. 5	597	10.	920	10.	721		20. 61	
	atom	4299	0	H0H	602	22.	175	2.			303		39. 23	
	atom	4300	0	НОН	603	22. 5			018		759		25. 24	
3 0	atom	4301	0	НОН	604			23.					11. 38	
	atom	4302	0	НОН	605			-15.			840		32. 40	
	atom	4303	0	НОН	606	23. 2	250	-5 .	255	39.	290		19. 0	
	atom	4304	0	НОН	607			18.			165		29. 80	
	atom	4305	0	НОН	608			-6.			607		26. 14	
3 5	atom	4306	0	НОН	609			-19.			102		30. 79	
	atom	4307	0	НОН	610	42 . 1	183	-16.	676	46.	222	1. 00	43. 54	4

```
45. 029
                                                       9. 354
                                                                9.054
                                                                         1. 00 41. 58
                                 611
      atom
              4308
                     0
                          HOH
                                                                         1. 00 47. 73
                                 612
                                            47. 451
                                                      26. 726
                                                                 6. 177
              4309
                          H0H
                     0
      atom
                                 613
                                              2.470
                                                      -1.802
                                                               27. 736
                                                                         1. 00 38. 21
              4310
                     0
                          HOH
      atom
                                            47. 043
                                                      21. 787
                                                               16. 034
                                                                         1. 00 23. 91
      atom
              4311
                     0
                          H0H
                                 614
                                                      17. 253
                                 615
                                            34. 075
                                                               18. 692
                                                                         1. 00 22. 58
              4312
                     0
                          H0H
 5
      atom
                                 616
                                            50. 817
                                                      23. 460 -12. 759
                                                                         1. 00 40. 31
              4313
                     0
                          HOH
      atom
                                                                         1. 00 25. 13
                                            38. 747
                                                       2. 676
                                                                 9.078
              4314
                          HOH
                                 617
      atom
                                                       0.690
                                                               23. 109
                                                                         1. 00 15. 25
                                 618
                                            35. 002
              4315
                     0
                          HOH
      atom
                                 619
                                            52. 799
                                                      16. 218
                                                               -9.314
                                                                         1. 00 39. 47
              4316
                     0
                          HOH
      atom
              4317
                          H0H
                                 620
                                            57. 492
                                                      32. 252
                                                               19. 690
                                                                         1. 00 51. 60
10
      atom
                     0
                                                      -2. 398 -12. 767
                                                                         1.00 35.98
                                 621
                                            24. 538
              4318
                     0
                          HOH
      atom
              4319
                          HOH
                                 622
                                            45. 774 -26. 860
                                                               17. 172
                                                                         1. 00 47. 38
                     0
      atom
                                                               -0.855
                                                                         1. 00 50. 73
                                 623
                                            16. 918 -0. 379
      atom
              4320
                     0
                          HOH
                                                                 0. 233
                                                                         1. 00 41. 40
                                 624
                                            35. 816 -18. 589
              4321
                     0
                          HOH
      atom
              4322
                          HOH
                                 625
                                            48. 368
                                                      29. 897
                                                               14. 750
                                                                         1. 00 21. 51
15
      atom
                     0
                                                       3.819
                                                               41. 949
                                                                         1. 00 11. 95
              4323
                     0
                          HOH
                                 626
                                            36. 518
      atom
              4324
                                 627
                                            43.658
                                                       6. 306 - 16.389
                                                                         1. 00 42. 56
                     0
                          H0H
      atom
                                                                         1.00 23.08
                                            48. 323
                                                      10.990
                                                                 7.196
              4325
                     0
                          HOH
                                 628
      atom
                                            38. 139 -19. 255
                                                                43. 774
                                                                         1.00 44.50
              4326
                                 629
                          HOH
      atom
                                                                         1. 00 24. 32
                                  630
                                            34. 071
                                                       6.076
                                                                12. 772
              4327
                     0
                          HOH
20
      atom
                                                                14. 337
                                                                         1. 00 39. 25
                                  631
                                            58. 322
                                                      10. 881
      atom
              4328
                     0
                          HOH
                                  632
                                            26. 691
                                                      26. 778
                                                                 4. 448
                                                                         1. 00 28. 44
              4329
                     0
                          HOH
      atom
                                                      24. 631
              4330
                     0
                          HOH
                                  633
                                            53. 979
                                                                19. 675
                                                                         1. 00 54. 93
      atom
                                                                         1.00 36.74
                                  634
                                              2.628
                                                       2. 180
                                                                11. 312
              4331
                          HOH
      atom
                                                      14. 418
                                                                28. 631
                                                                         1.00 35.56
              4332
                          HOH
                                  635
                                              5. 149
                     0
25
      atom
                                            32. 587
                                                      -3.817
                                                                12. 697
                                                                         1. 00 63. 31
              4333
                     0
                          HOH
                                  636
      atom
                                                                31.802
                                                                         1. 00 24. 21
                                  637
                                            27. 170
                                                      -9.280
              4334
                          HOH
      atom
                     0
                          H0H
                                  638
                                            43. 450
                                                       5. 359
                                                                10. 944
                                                                         1.00 36.10
              4335
                     0
      atom
              4336
                          H0H
                                  639
                                            26. 062 -12. 225
                                                                14. 751
                                                                         1. 00 49. 87
      atom
                     0
                                                       7. 497
                                                                -5.096
                                                                         1. 00 18. 84
              4337
                          H0H
                                  640
                                            14. 706
3 0
                     0
      atom
              4338
                                            57. 477 -14. 762
                                                                35. 981
                                                                         1. 00 28. 21
                     0
                          HOH
                                  641
      atom
                                             51. 547
                                                       9. 783
                                                                48. 172
                                                                         1. 00 53. 68
              4339
                     0
                          HOH
                                  642
      atom
                                                                -7. 733
                                                                         1. 00 35. 43
                                  643
                                            30. 933
                                                      -6. 757
               4340
                     0
                          HOH
      atom
                                            25. 070
                                                     13. 151
                                                                 5. 827
                                                                         1. 00 2. 00
              4341
                     0
                          HOH
                                  644
      atom
                                  645
                                            56. 672 -10. 309
                                                                18. 187
                                                                         1. 00 45. 96
35
      atom
               4342
                     0
                          HOH
                                                                 6.160
                                                                         1. 00 28. 95
                                  646
                                             11. 579
                                                      20. 415
               4343
                     0
                          HOH
      atom
```

```
1.00 18.06
                                             27. 916 -15. 124
                                                                 2. 287
      atom
              4344 0
                          HOH
                                  647
                                                       2. 326
                                                                34. 458
                                                                         1. 00 25. 12
                          HOH
                                  648
                                             35. 221
              4345
                     0
      atom
                                             38. 312
                                                       9. 262
                                                                36. 937
                                                                         1. 00 67. 07
              4346
                          HOH
                                 649
      atom
                     0
                                                       6. 938
                                                                         1. 00 24. 22
      atom
              4347
                     0
                          HOH
                                  650
                                             46. 258
                                                                 4. 683
                                             42.606
                                                      -3.262
                                                                36. 649
                                                                         1. 00 21. 46
              4348
                          HOH
                                  651
                     0
 5
      atom
                                             40. 235
                                                      11. 518
                                                                20.853
                                                                         1.00 27.91
              4349
                     0
                          HOH
                                  652
      atom
                                             22. 794
                                                      25. 287
                                                                 5. 447
                                                                         1. 00 26. 04
              4350
                          HOH
                                  653
      atom
                     0
                                                       9. 504 -13. 291
                                             38. 206
                                                                         1. 00 30. 62
              4351
                          HOH
                                  654
      atom
                     0
                                             45. 226
                                                      13. 150
                                                                18.803
                                                                         1. 00 18. 63
              4352
                     0
                          HOH
                                  655
      atom
                                             33. 031 -18. 621
                                                                22. 852
                                                                         1. 00 44. 32
              4353
                     0
                          HOH
                                  656
10
      atom
                                              9.650
                                                      -6.271
                                                                22. 144
                                                                         1. 00 32. 02
              4354
                          HOH
                                  657
                     0
      atom
              4355
                                  658
                                             30.463
                                                      24. 471
                                                                -1.145
                                                                         1. 00 18. 42
                     0
                          HOH
      atom
                                             41. 452
                                                        8.031
                                                                 8.619
                                                                         1. 00 20. 10
              4356
                     0
                          HOH
                                  659
      atom
                                                                         1. 00 13. 22
                                  660
                                             24. 327
                                                        5. 781
                                                                 5. 531
              4357
                     0
                          HOH
      atom
                                             47. 983
                                                        6. 984 -10. 411
                                                                         1. 00 60. 77
      atom
              4358
                     0
                          HOH
                                  661
15
                                             30. 966 -22. 909
              4359
                          HOH
                                  662
                                                                 5. 590
                                                                         1. 00 36. 24
      atom
                     0
                                             33. 405
                                                      -1.565
                                                                17. 123
                                                                         1. 00 38. 51
              4360
                          H0H
                                  663
                     0
      atom
                                                                -8.594
                                                                         1. 00 32. 16
              4361
                     0
                          HOH
                                  664
                                             21.076
                                                       7. 717
      atom
                                  665
                                             16. 982
                                                      24. 733
                                                                15. 974
                                                                         1. 00 34. 58
              4362
                          HOH
      atom
                     0
                                                      23. 531
                                                                         1. 00 31. 58
              4363
                      0
                          HOH
                                  666
                                             26. 953
                                                                 1. 354
20
      atom
                                                                44. 640
                                                                          1. 00 37. 35
      atom
              4364
                     0
                          HOH
                                  667
                                             40. 572 -13. 743
                                                                         1. 00 41. 72
              4365
                          H0H
                                  668
                                             31. 441
                                                        0. 335
                                                                 7. 724
      atom
                      0
              4366
                          HOH
                                  669
                                             47. 678
                                                      -7. 636
                                                                13. 712
                                                                          1. 00 31. 80
      atom
                      0
                                                      22. 825 -11. 411
                                                                          1. 00 67. 81
                                             46. 557
      atom
               4367
                          HOH
                                  670
                                                                          1.00 10.38
               4368
                                  671
                                             21. 234
                                                      10. 081
                                                               -2. 885
                          HOH
25
      atom
                      0
                                                                          1.00 24.09
               4369
                      0
                           H0H
                                  672
                                             31. 211
                                                      -1.023
                                                                 4. 408
      atom
                                                      -6. 813 -11. 682
                                                                          1. 00 21. 54
                           HOH
                                  673
                                             50. 141
      atom
               4370
                      0
               4371
                      0
                           HOH
                                  674
                                             33. 244
                                                      15. 024
                                                                -9. 889
                                                                          1. 00 67. 86
      atom
                                             38. 979
                                                      11. 058
                                                                31. 410
                                                                          1. 00 26. 12
               4372
                      0
                           HOH
                                  675
      atom
                                             34. 118
                                                       11. 305
                                                                 3. 467
                                                                          1. 00 28. 25
               4373
                          HOH
                                  676
30
      atom
                      0
                                             46. 763 -27. 510
                                                                31.664
                                                                          1. 00 52. 83
               4374
                          HOH
                                  677
                      0
      atom
                                                        2.565
                                                                 8.047
                                                                          1. 00 28. 30
               4375
                          HOH
                                  678
                                             35. 099
      atom
                     0
                                                      25. 088
                                                                 4. 798
                                                                          1. 00 18. 72
               4376
                          HOH
                                  679
                                              9. 176
      atom
                      0
                                                                25. 182
                                                                          1. 00 48. 26
               4377
                           HOH
                                  680
                                             14. 704
                                                      13. 412
      atom
                                              6. 438
                                                        4. 023
                                                                 3. 328
                                                                          1. 00 61. 72
               4378
                      0
                           HOH
                                  681
35
      atom
                                             32. 219
                                                                 2. 622
                                                                          1. 00 38. 25
               4379
                      0
                           HOH
                                  682
                                                      15. 747
      atom
```

```
683
                                            31. 014 -13. 129
                                                              15. 368
                                                                         1.00 36.02
      atom
              4380
                     0
                          HOH
                                                      22. 998 -13. 412
              4381
                          HOH
                                 684
                                            41. 423
                                                                         1. 00 46. 45
                     0
      atom
                                                               32. 544
                                                                         1. 00 57. 67
              4382
                          HOH
                                 685
                                            41. 073
                                                      14. 541
      atom
                     0
      atom
              4383
                          HOH
                                 686
                                            41. 923
                                                      30. 239
                                                               10. 109
                                                                         1. 00 24. 51
                                                                         1.00 45.08
              4384
                          HOH
                                 687
                                            13. 043
                                                       1.835
                                                                1. 524
                     0
 5
      atom
                                            36. 384
                                                       1.728
                                                                2. 325
                                                                         1. 00 23. 11
              4385
                     0
                          HOH
                                 688
      atom
                                                                         1.00 26.09
              4386
                          HOH
                                 689
                                            38. 926 -12. 759
                                                               41. 527
      atom
                                 690
                                            13. 533
                                                       4. 342
                                                               -1.256
                                                                         1. 00 53. 49
              4387
                          HOH
      atom
                     0
                                                                         1. 00 49. 63
              4388
                     0
                          HOH
                                 691
                                            42. 859 -30. 767
                                                               29. 292
      atom
                                  692
                                            46. 981
                                                      -5. 614 -11. 265
                                                                         1. 00 28. 30
      atom
              4389
                          HOH
10
                                            34. 904
                                                                2.841
                                                                         1.00 25.95
              4390
                          HOH
                                 693
                                                      -2. 672
                     0
      atom
              4391
                                  694
                                            22. 975
                                                      23. 743
                                                                2. 224
                                                                         1.00 32.47
                     0
                          HOH
      atom
                                                      14. 150
                                                               31. 270
                                                                         1. 00 37. 81
              4392
                     0
                          HOH
                                  695
                                            45. 861
      atom
                                                      15.972
                                                               22.828
                                                                         1.00 88.18
                                  696
                                            46. 016
              4393
                     0
                          HOH
      atom
              4394
                                  697
                                            13. 753
                                                      -0.702
                                                               38. 177
                                                                         1. 00 52. 89
      atom
                     0
                          HOH
15
              4395
                          HOH
                                  698
                                            34. 502
                                                      16. 040
                                                               22. 414
                                                                         1. 00 27. 95
      atom
                     0
                                            22.706
                                                      27. 973
                                                               10.089
              4396
                          HOH
                                  699
                                                                         1. 00 35. 75
                     0
      atom
              4397
                     0
                          HOH
                                  700
                                            63. 426 -24. 001
                                                               17. 375
                                                                         1. 00 42. 25
      atom
                                  701
                                                                         1.00 9.34
              4398
                          HOH
                                            34. 349
                                                       9.690
                                                                1. 548
      atom
                     0
                                                                         1. 00 27. 48
              4399
                     0
                          HOH
                                  702
                                            41. 163
                                                       2. 343
                                                               49. 912
20
      atom
      atom
              4400
                     0
                          HOH
                                  703
                                             9. 851
                                                      15. 333
                                                               21. 500
                                                                         1. 00 58. 68
              4401
                     0
                          HOH
                                  704
                                            44. 019
                                                      27. 355
                                                               14. 119
                                                                         1. 00 23. 41
      atom
              4402
                     0
                          HOH
                                  705
                                            47. 294
                                                      -8. 487
                                                               10. 420
                                                                         1.00 28.83
      atom
                                                               21.058
                          H0H
                                  706
                                            -0. 567 -15. 964
                                                                         1. 00 71. 82
      atom
               4403
                     0
              4404
                                  707
                                            45. 139
                                                      17. 223
                                                               28. 013
                                                                         1. 00 36. 95
                     0
                          HOH
      atom
25
              4405
                     0
                          HOH
                                  708
                                            54. 938
                                                      29. 596
                                                               18.826
                                                                         1. 00 45. 27
      atom
               4406
                          HOH
                                  709
                                            56. 658
                                                      -1.774
                                                               11. 129
                                                                         1. 00 59. 82
      atom
                      0
                                                                         1. 00 83. 26
               4407
                     0
                          HOH
                                  710
                                            41. 378
                                                      -2. 253
                                                               48. 336
      atom
                                                       0.844
                                                               32. 187
                                                                         1. 00 19. 51
      atom
               4408
                      0
                          H0H
                                  711
                                            34. 016
                                  712
                                                      23. 922
                                                               18. 790
                                                                         1.00 40.86
               4409
                          HOH
                                            40.079
3 0
      atom
                      0
                                                                         1.00 73.98
                      0
                          HOH
                                  713
                                            23. 939
                                                      16. 548
                                                               -6. 662
               4410
      atom
               4411
                      0
                          HOH
                                  714
                                            43. 805
                                                      -5. 760
                                                               37. 997
                                                                         1.00 33.15
      atom
                                                                 7.024
                          HOH
                                  715
                                            43. 983
                                                      12. 763
                                                                         1. 00 49. 45
      atom
               4412
                      0
               4413
                          H0H
                                  716
                                            17. 467
                                                      -6. 790
                                                               34. 490
                                                                         1. 00 60. 85
      atom
                                            57. 128
                                                      -9.673
                                                                 7.961
               4414
                      0
                          HOH
                                  717
                                                                         1. 00 47. 78
35
      atom
               4415
                      0
                          HOH
                                  718
                                            28. 310 -13. 504
                                                               15. 674
                                                                         1. 00 32. 19
      atom
```

```
12. 483
                                                               24.005
                                                                         1. 00 59. 90
                          HOH
                                 719
                                            48. 350
      atom
              4416
                     0
                                 720
                                            19.085
                                                       8. 242
                                                               -9.951
                                                                         1. 00 25. 97
              4417
                          HOH
      atom
                     0
                                 721
                                            55. 772
                                                     11. 621
                                                               19. 184
                                                                         1. 00 35. 36
              4418
                     0
                          H0H
      atom
                                                     15. 603
                                                               32. 528
                                                                         1. 00 63. 48
      atom
              4419
                     0
                          HOH
                                 722
                                             7. 019
                          HOH
                                 723
                                            36. 866 -13. 652
                                                               15. 802
                                                                         1. 00 27. 53
              4420
                     0
      atom
 5
              4421
                          HOH
                                 724
                                            43. 517
                                                     24. 315 -12. 119
                                                                         1.00 35.85
      atom
                     0
                                 725
                                            37. 708 −15. 785
                                                               39. 175
                                                                         1. 00 54. 73
      atom
              4422
                     0
                          H0H
                                                               34. 330
                                                                         1. 00 62. 89
              4423
                          H0H
                                 726
                                             5. 217
                                                       0.089
                     0
      atom
                                 727
                                            22. 932
                                                     16. 773
                                                               24. 935
                                                                         1.00 39.55
      atom
              4424
                     0
                          HOH
              4425
                          HOH
                                 728
                                            57. 302
                                                     -9. 957
                                                               -7.609
                                                                         1. 00 30. 04
10
      atom
                     0
                          H0H
                                 729
                                             7. 732
                                                       5. 303
                                                               -6.078
                                                                         1. 00 77. 38
              4426
                     0
      atom
              4427
                          H0H
                                 730
                                            20. 565
                                                     18. 229
                                                               -3.485
                                                                         1. 00 34. 46
      atom
                     0
                                                                         1.00 45.60
                                 731
                                            40. 313
                                                     14. 721
                                                               37. 485
      atom
              4428
                     0
                          HOH
                                                                         1.00 52.20
              4429
                                 732
                                            45. 334 -26. 610
                                                                3. 300
                     0
                          HOH
      atom
              4430
                          HOH
                                 733
                                            21. 456
                                                     12. 342
                                                               33. 566
                                                                         1. 00 43. 56
15
      atom
                     0
                                                               -7.495
                                                                         1. 00 34. 62
              4431
                     0
                          HOH
                                 734
                                            53. 572
                                                     28. 112
      atom
              4432
                          HOH
                                            44. 392
                                                       3. 535 -16. 228
                                                                         1. 00 30. 67
                     0
                                 735
      atom
                                            21. 788
                                                     26. 910
                                                               17. 354
                                                                         1.00 29.40
      atom
              4433
                     0
                          HOH
                                 736
                                                               22.679
                                                                         1. 00 34. 59
              4434
                                 737
                                             1. 982 -17. 218
                     0
                          HOH
      atom
                                 738
                                            49. 791 -14. 945
                                                               51. 490
                                                                         1. 00 29. 55
20
              4435
                     0
                          HOH
      atom
                                                               31. 724
                                                                         1. 00 21. 33
      atom
              4436
                          HOH
                                 739
                                            65. 383 -10. 773
                                            48. 882 -23. 983
                                                               38. 693
                                                                         1. 00 27. 07
              4437
                     0
                          HOH
                                 740
      atom
              4438
                     0
                          H0H
                                 741
                                            38. 324
                                                     18. 978
                                                               30. 698
                                                                         1. 00 51. 87
      atom
                                            18. 500
                                                     12. 871
                                                               19.098
                                                                         1. 00 37. 82
              4439
                          HOH
                                 742
      atom
                                            43. 444 -24. 077
                                                                 3. 285
                                                                         1.00 34.56
              4440
                     0
                          H0H
                                 743
25
      atom
                                                               20.678
                                                                         1.00 31.54
              4441
                     0
                          HOH
                                 744
                                            19. 073
                                                     14. 997
      atom
                                            43. 718
                                                      14. 040
                                                               -9. 258
                                                                         1. 00 48. 86
              4442
                     0
                          HOH
                                 745
      atom
                                                      12. 108
                                                               21. 932
                                                                         1. 00 16. 56
      atom
              4443
                     0
                          HOH
                                 746
                                            19. 757
              4444
                          HOH
                                 747
                                            28. 539
                                                      -1.306
                                                                 9. 121
                                                                         1. 00 19. 91
      atom
                     0
                                                               28. 355
                                                                         1. 00 31. 35
              4445
                          HOH
                                 748
                                            33. 299
                                                      13. 289
30
      atom
                     0
                                            55. 796
                                                       5. 609
                                                               21.850
                                                                         1. 00 25. 26
              4446
                     0
                          HOH
                                 749
      atom
                                            71. 236
                                                      -9.462
                                                               30. 197
                                                                         1. 00 16. 58
      atom
              4447
                     0
                          HOH
                                 750
                                                                         1. 00 53. 92
                                 751
                                            48. 317
                                                      16. 021
                                                               28. 186
              4448
                     0
                          HOH
      atom
                                            37. 023 -14. 017 -12. 141
                                                                         1. 00 60. 05
      atom
              4449
                     0
                          HOH
                                  752
                                  753
                                            47. 056
                                                     10. 022 14. 240
                                                                         1. 00 16. 37
35
      atom
              4450
                     0
                          HOH
                          HOH
                                  754
                                            41. 937 -14. 514 -12. 014
                                                                         1. 00 28. 96
      atom
              4451
                     0
```

```
18. 257 -4. 318
                                                                        1. 00 24. 23
              4452
                          HOH
                                 755
                                            58. 191
      atom
                     0
                                 756
                                            34. 855
                                                     15. 167 -13. 410
                                                                        1. 00 26. 63
              4453
                          HOH
      atom
                     0
                                 757
                                            46. 083
                                                       7. 332
                                                               -4. 348
                                                                         1. 00 41. 74
              4454
                     0
                          H0H
      atom
                                            34. 334
                                                      19. 475
                                                               20. 562
                                                                         1. 00 36. 75
      atom
              4455
                          H0H
                                 758
              4456
                          HOH
                                 759
                                            48. 439
                                                      12. 298
                                                               18. 766
                                                                         1. 00 37. 20
                     0
      atom
 5
              4457
                          HOH
                                 760
                                            26. 446
                                                       9.654
                                                               -7.040
                                                                         1. 00 24. 37
      atom
                     0
                                            43. 303
                                                       7. 883 -11. 435
                                                                         1. 00 27. 78
      atom
              4458
                     0
                          HOH
                                 761
                                                      18. 574
                                                               16. 107
                                                                         1. 00 41. 69
              4459
                          HOH
                                 762
                                            20. 443
                     0
      atom
                                            48. 286
                                                      15. 033
                                                               32. 831
                                                                         1. 00 57. 35
      atom
              4460
                     0
                          HOH
                                 763
                                                      18. 980
                          H0H
                                 764
                                            10.893
                                                               16. 387
                                                                         1. 00 59. 57
10
      atom
              4461
                     0
                                                                         1.00 43.50
              4462
                                 765
                                            34. 601
                                                       4. 808
                                                               35. 497
                     0
                          H0H
      atom
              4463
                          HOH
                                 766
                                            31.888
                                                      17. 167
                                                               -8.403
                                                                         1. 00 52. 16
                     0
      atom
                                                      -3.491
                                                               21. 106
                                                                         1. 00 13. 51
                                 767
                                            36. 373
      atom
              4464
                     0
                          HOH
                                                                         1.00 41.10
                                 768
                                            23. 246
                                                      19. 202
                                                               -6.517
              4465
                          HOH
      atom
              4466
                          HOH
                                 769
                                            45. 743
                                                      17. 021
                                                               -5. 597
                                                                         1. 00 31. 22
15
      atom
                     0
                                            33. 244 -13. 586
                                                               18. 326
                                                                         1. 00 41. 46
              4467
                     0
                          H0H
                                 770
      atom
                                 771
                                            57. 928
                                                     30. 606
                                                               16. 929
                                                                         1. 00 38. 33
              4468
                     0
                          H0H
      atom
                                                               27. 989
                                                                         1.00 69.32
                                            69. 124 -11. 949
      atom
              4469
                     0
                          HOH
                                  772
                                            29. 727 -22. 652
                                                               27. 281
                                                                         1. 00 30. 26
              4470
                          HOH
                                  773
      atom
                                  774
                                            37. 839
                                                     -4. 465
                                                               13.760
                                                                         1. 00 22. 09
              4471
                     0
                          HOH
20
      atom
                                            41. 248
                                                      -0.915
                                                               16. 241
                                                                         1. 00 49. 75
      atom
              4472
                          HOH
                                  775
                                  776
                                            32. 612 -23. 200
                                                               24. 163
                                                                         1. 00 53. 24
              4473
                     0
                          HOH
      atom
              4474
                     0
                          HOH
                                  777
                                            47. 550
                                                      17. 765
                                                               -7.284
                                                                         1. 00 30. 72
      atom
                                                                         1. 00 12. 35
                                  778
                                            22. 460
                                                      12. 258
                                                                 5.644
              4475
                          HOH
      atom
                                  779
                                                      19.969
                                                               17. 253
                                                                         1. 00 24. 63
              4476
                          HOH
                                             6. 843
25
      atom
                     0
                                                                         1.00 32.13
                                            -1.037
                                                       0.592
                                                               12. 041
              4477
                     0
                          HOH
                                  780
      atom
                                                               -1.036
                                                                         1. 00 31. 03
                                  781
                                            16. 879
                                                      16. 213
              4478
                     0
                          HOH
      atom
                                  782
                                             4. 952 -10. 654
                                                               24. 420
                                                                         1.00 66.04
      atom
              4479
                     0
                          H0H
               4480
                          H0H
                                  783
                                            30. 976
                                                      21. 960
                                                               23. 463
                                                                         1. 00 26. 66
      atom
                     0
                                            54. 549 -16. 852
                                                               43. 639
                                                                         1. 00 44. 86
                          HOH
                                  784
30
      atom
               4481
                     0
                                  785
                                            35. 858
                                                       0. 543
                                                               37. 145
                                                                         1.00 32.91
               4482
                     0
                          HOH
      atom
                                                                         1.00 25.52
                                            37. 629
                                                       0. 228
                                                               45. 081
      atom
               4483
                     0
                          HOH
                                  786
                                            34. 090 -24. 595
                                                               29. 357
                                                                         1. 00 44. 67
                                  787
               4484
                     0
                          HOH
      atom
                                  788
                                            51. 277
                                                      31. 211
                                                               -7. 019
                                                                         1. 00 41. 33
      atom
               4485
                     0
                          HOH
                                                                         1. 00 72. 82
                                  789
                                            30. 912
                                                      -2.933
                                                               10.609
35
      atom
               4486
                     0
                          HOH
                                                      -7. 303 -10. 029
                                                                         1. 00 58. 21
                                  790
                                            58. 746
      atom
               4487
                     0
                          HOH
```

```
14. 157
                                                               19. 431
                                                                         1.00 35.15
      atom
              4488
                     0
                          HOH
                                 791
                                            53. 940
                                                                         1.00 47.16
              4489
                          HOH
                                 792
                                            32. 011
                                                     -0.149
                                                               14. 251
                     0
      atom
                                                                8. 528
                                                                         1. 00 53. 03
              4490
                          HOH
                                 793
                                            13. 553
                                                      23. 341
      atom
                     0
      atom
              4491
                     0
                          HOH
                                 794
                                            37. 675
                                                     -7. 811
                                                               -8.912
                                                                         1. 00 44. 94
                                                                 3. 142
                                                                         1.00 41.74
              4492
                          H0H
                                 795
                                            48. 715
                                                     -0. 365
                     0
 5
      atom
                                            50. 589 -16. 659
                                                                 6.378
                                                                         1. 00 18. 40
              4493
                     0
                          H0H
                                 796
      atom
                                                                 6.859
                                                                         1.00 36.05
              4494
                          HOH
                                 797
                                            44. 199 -19. 067
      atom
                     0
                                            53. 441 -26. 855
                                                               20. 517
                                                                         1. 00 50. 57
              4495
                          HOH
                                 798
      atom
                     0
                                                               20. 724
                                                                         1. 00 50. 72
              4496
                     0
                          HOH
                                 799
                                            49. 408 -26. 628
      atom
                                            52.640 -19.756
                                                               30. 198
                                                                         1.00 47.50
              4497
                     0
                          HOH
                                 800
10
      atom
                                                               -9.706
                                                                         1.00 21.84
              4498
                          HOH
                                 801
                                            18. 857
                                                       3. 501
                     0
      atom
                                                       1. 182 -11. 952
                                            17.896
                                                                         1.00 32.00
              4499
                     0
                          HOH
                                 802
      atom
                                                       4. 000 -10. 397
                                                                         1.00 46.84
              4500
                     0
                          HOH
                                 803
                                            13. 919
      atom
                                                                         1. 00 48. 55
                                            11. 557
                                                       5. 995
                                                               -4. 803
              4501
                          HOH
                                 804
      atom
                     0
                                            11. 140
                                                       9. 279
                                                                 7.880
                                                                         1. 00 25. 88
      atom
              4502
                     0
                          HOH
                                 805
15
                                                                         1.00 34.39
              4503
                          HOH
                                 806
                                            18. 676
                                                      16. 664
                                                                 2. 033
      atom
                     0
                                            27. 433
                                                      31.963
                                                               16.774
                                                                         1.00 20.95
              4504
                          HOH
                                 807
                     0
      atom
                                                                         1.00 33.76
              4505
                          HOH
                                 808
                                            53. 253
                                                      29. 573
                                                                 9.882
      atom
                     0
                                            54. 907
                                                      28.009
                                                               11. 555
                                                                         1. 00 52. 31
                          H0H
                                 809
      atom
              4506
                     0
                                                      11. 739
                                                               -4.252
                                                                         1. 00 32. 53
                                            62. 641
              4507
                     0
                          HOH
                                 810
20
      atom
      atom
              4508
                     0
                          HOH
                                 811
                                            65. 068
                                                       5. 329
                                                                 5. 372
                                                                         1. 00 54. 51
                                                                         1. 00 47. 37
              4509
                          H0H
                                 812
                                            65. 803
                                                       8.849
                                                                 4. 108
                     0
      atom
              4510
                          HOH
                                 813
                                            43. 721
                                                      20. 002 -11. 175
                                                                         1.00 30.38
                     0
      atom
                                                                         1. 00 41. 80
                                            34. 406 -17. 139
                                                               17. 170
      atom
              4511
                     0
                          HOH
                                 814
                                            34. 703 -23. 625
                                                                 4. 105
                                                                         1. 00 61. 03
              4512
                          HOH
                                 815
25
                     0
      atom
                     0
                          HOH
                                 816
                                            34. 197 -17. 469
                                                                 3. 287
                                                                         1. 00 44. 37
              4513
      atom
                                                               -2. 288
                                                                         1. 00 25. 23
                          HOH
                                 817
                                            50. 104
                                                       7. 478
      atom
              4514
                     0
              4515
                          H0H
                                 818
                                            41. 677
                                                      18. 551
                                                               18. 796
                                                                         1. 00 45. 33
      atom
                     0
                                            38. 682
                                                               20. 416
                                                                         1. 00 45. 22
              4516
                          H0H
                                 819
                                                      19. 681
      atom
                     0
                                            11.768
                                                       4. 457
                                                               37. 706
                                                                         1. 00 51. 55
              4517
                          HOH
                                 820
30
      atom
                     0
                                                               37. 720
                                 821
                                             8. 218
                                                       0.919
                                                                         1. 00 44. 65
              4518
                     0
                          HOH
      atom
              4519
                          HOH
                                 822
                                             3. 397
                                                      -1. 753
                                                               33. 199
                                                                         1. 00 33. 07
      atom
                     0
                                                                         1. 00 31. 48
                                 823
                                            34. 080
                                                       1. 178
                                                                 3. 231
      atom
              4520
                     0
                          HOH
              4521
                          H0H
                                 824
                                            31. 348
                                                      10. 501
                                                               -7. 664
                                                                         1. 00 31. 78
      atom
                     0
                                            38. 108
                                                       4. 850 -12. 161
                                                                         1.00 31.16
               4522
                     0
                          H0H
                                  825
35
      atom
               4523
                          HOH
                                  826
                                            38. 982
                                                      10. 342
                                                               10. 406
                                                                         1. 00 32. 25
      atom
                      0
```

```
1.00 31.34
                                             5. 149
                                                       5.654
                                                               13. 265
              4524
                     0
                          HOH
                                 827
      atom
                                                               20. 222
                                                                        1.00 49.34
                                 828
                                             6.416
                                                     -8.088
              4525
                          H0H
      atom
                     0
                                                               18. 913
                                                                        1. 00 33. 22
                                 829
                                            -1.858
                                                     -3.132
              4526
                     0
                          HOH
      atom
                                                                         1. 00 29. 62
              4527
                     0
                          HOH
                                 830
                                            11. 873
                                                       9. 162
                                                                4. 510
      atom
                                            19. 232
                                                     -5.660
                                                               17. 559
                                                                        1. 00 26. 97
                                 831
              4528
                          HOH
      atom
                     0
 5
                                            12. 983
                                                     -8.915
                                                               15. 306 1. 00 41. 69
                                 832
              4529
                     0
                          HOH
      atom
                                                               21.008
                                                                         1. 00 35. 22
                                 833
                                            18. 416 -11. 585
              4530
                     0
                          HOH
      atom
                                            22. 507
                                                     -3.262
                                                               33. 451
                                                                         1. 00 77. 42
                                 834
      atom
              4531
                     0
                          HOH
                                                                         1. 00 26. 33
                          HOH
                                 835
                                            26. 191
                                                     -1.017
                                                               24. 576
              4532
                     0
      atom
                                                     -0.682
                                                               16. 799
                                                                         1. 00 25. 51
              4533
                          HOH
                                 836
                                            36. 425
      atom
                     0
10
                                                               19. 428
                                                                         1. 00 35. 47
                                 837
                                            36. 167
                                                       2. 136
              4534
                          HOH
      atom
                     0
                                 838
                                            31. 892
                                                     -9.361
                                                               18. 329
                                                                         1.00 38.04
              4535
                     0
                          HOH
      atom
                                                       0. 247
                                                               50. 234
                                                                         1. 00 39. 65
              4536
                          HOH
                                 839
                                            29. 958
                     0
      atom
                                                                         1. 00 25. 56
                                            25. 664
                                                     -2.880
                                                               45. 446
              4537
                          HOH
                                 840
      atom
                     0
                                            28. 111 -11. 787
                                                               23. 722
                                                                         1. 00 20. 36
              4538
                     0
                          HOH
                                 841
      atom
15
                                                               20.864
                                                                         1. 00 48. 90
                                 842
                                            25. 802 -13. 741
              4539
                     0
                          H0H
      atom
                                                               27. 755
                                                                         1. 00 46. 58
                                 843
                                            66. 721 -13. 408
              4540
                     0
                          H0H
      atom
                                                               36.898
                                                                         1. 00 35. 37
              4541
                                 844
                                            64. 307 -3. 316
                     0
                          HOH
      atom
                                                                         1.00 37.85
                                                     -0.436
                                                               36. 938
                                 845
                                            65. 583
      atom
              4542
                     0
                          HOH
                                            41. 048 -10. 431
                                                               50.836
                                                                         1. 00 29. 82
                                 846
                     0
                          HOH
20
      atom
              4543
                                                                         1.00 64.44
              4544
                     0
                          HOH
                                 847
                                            41. 737
                                                      18. 341
                                                               25. 701
      atom
                                                      -2. 921 -11. 856
                                                                         1. 00 30. 43
                                 848
                                            30. 918
              4545
                     0
                          HOH
      atom
                                 849
                                            51. 446
                                                      22. 839
                                                               17. 216
                                                                         1. 00 43. 87
              4546
                     0
                          HOH
      atom
                                                               -0.874
                                                                         1.00 35.10
                                  850
                                            60. 785
                                                       2. 614
      atom
              4547
                      0
                          H0H
                                                                         1. 00 49. 62
                                            56. 838
                                                      -0.895
                                                                 2. 586
                          HOH
                                  851
              4548
                      0
25
      atom
                                                                         1.00 52.54
                                  852
                                            47. 396
                                                      10.491
                                                               -8.843
              4549
                      0
                          HOH
      atom
                                                                 4. 444
                                                                         1. 00 30. 06
                                  853
                                             38. 574 -14. 690
      atom
              4550
                      0
                          HOH
                                                                         1.00 39.05
              4551
                          H0H
                                  854
                                             18. 756
                                                      -0.542
                                                               39. 542
                      0
      atom
                                             29. 513
                                                      29. 579
                                                                 6. 595
                                                                         1. 00 36. 41
               4552
                      0
                          HOH
                                  855
      atom
                                                                         1. 00 28. 63
                                             32. 813
                                                      33. 195
                                                                 8. 357
                          HOH
                                  856
      atom
               4553
                      0
30
                                                       7. 094 -13. 994
                                                                         1.00 29.74
                                  857
                                             40. 705
               4554
                      0
                          H0H
      atom
                                                       1. 421
                                                               -2.924
                                                                         1. 00 31. 42
               4555
                          HOH
                                  858
                                             50. 499
                      0
      atom
                                                       0.293 - 15.630
                                                                         1. 00 26. 52
                                  859
                                             47. 470
      atom
               4556
                      0
                          HOH
                                                                         1. 00 27. 08
                                  860
                                             46. 826
                                                      -4. 091
                                                                15. 608
               4557
                      0
                          HOH
      atom
                                                      -1. 915
                                                                20.388
                                                                         1. 00 50. 46
               4558
                      0
                           H0H
                                  861
                                             43. 465
35
      atom
                                                                42. 274
                                                                         1. 00 25. 43
                                  862
                                             39. 396
                                                      -8. 251
      atom
               4559
                      0
                           H0H
```

```
62. 025 -4. 244 31. 799 1. 00 24. 26
     atom
            4560 0
                       HOH
                             863
                       HOH
                                              10. 747 31. 485 1. 00 32. 16
            4561
                             864
                                       51. 328
     atom
                  0
                                       35. 283
                                                7. 979 42. 362 1. 00 38. 81
            4562 0
                       HOH
                             865
     atom
                                       57. 095 -18. 565 40. 803 1. 00 52. 30
     atom
            4563 0
                       HOH
                             866
                       HOH
                                       58. 155
                                              -2. 683 46. 266 1. 00 22. 74
            4564 0
                             867
 5
     atom
                       HOH
                             868
                                       48. 057 20. 382 -12. 222 1. 00 50. 35
            4565 0
     atom
                                                         0. 838 1. 00 51. 45
             4566 0
                       H0H
                             869
                                       49. 547
                                                0. 925
     atom
                       HOH
                             870
                                       46. 392
                                                4. 053
                                                         4. 644 1. 00 50. 25
             4567 0
     atom
                                       17. 601 15. 375 19. 352 1. 00 65. 08
     atom
             4568 0
                       HOH
                             871
                       HOH
                             872
                                        4. 479
                                                9. 329 31. 775 1. 00 36. 17
     atom
             4569 0
10
                                       22. 319 18. 788 -0. 495 1. 00 24. 87
             4570 0
                       HOH
                             873
     atom
                       HOH
                             874
                                       35. 839 30. 245 -0. 342 1. 00 48. 51
             4571 0
     atom
                                       48. 453
                                               2. 849 -6. 547 1. 00 33. 73
     atom
             4572 0
                       HOH
                             875
                                                7. 424 25. 945 1. 00 39. 41
                       HOH
                             876
                                        0. 605
     atom
             4573 0
             4574 0
                       HOH
                             877
                                        2. 396 -3. 829 13. 234 1. 00 30. 89
     atom
15
                                       14. 152 -2. 287 5. 419 1. 00 18. 22
             4575 0
                       HOH
                             878
     atom
                                       35. 704 -8. 865 16. 297 1. 00 31. 23
             4576 0
                       HOH
                             879
     atom
                                       47. 890 11. 218 33. 219 1. 00 51. 93
     atom
             4577 0
                       HOH
                             880
                             881
                                       35. 361
                                                8. 156 33. 971 1. 00 47. 66
             4578 0
                       HOH
     atom
                                       40. 052
                                                7. 610 41. 373 1. 00 36. 84
             4579 0
                       HOH
                             882
20
     atom
                                       56. 929 -15. 208 46. 351 1. 00 55. 62
     atom
             4580 0
                       HOH
                             883
             4581 0
                       HOH
                             884
                                       52. 052 -0. 414 49. 836 1. 00 55. 41
     atom
```

[0022]

25

3 0

3 5

The structure of the HCV polymerase was visualized using the program software RasMol (Free Soft, Roger Sayle, Glaxo Research & Development, Greenford, Middlesex, UK) (Fig. 1).

The HCV polymerase belongs to the space group of $P4_32_12$ of a = b = 63.7 Å, c = 262.9 Å, and is 67 x 63 x 68 Å spherical protein comprising the cone shape in the structure. The HCV polymerase has a glove-like structure shown in Fig. 1, comprising Fingers, Palm, Thumb, and Holder domains.

The Holder domain had an unknown structure, which had not been found even in the poliovirus (Structure 5, 1109-1122 (1997)).

Fig. 2 schematically shows the structure of the HCV polymerase. The Finger domain comprises four? sheets and one? helix, similar

to the structure of the HIV reverse transcriptase, although there is no amino acid sequence similarity to this enzyme. There are two long loops (one loop extending from the N-terminus to? A helix, and the other loop between? 1 and? 2), and a reticular net is formed from the lower part of the cone shape to the upper end of the Thumb domain. The lower part of the net is open, and presumably is the entrance for the substrate ribonucleoside triphosphate (rNTP).

5

10

15

20

25

30

35

As described above, in the crystal structure of the poliovirus polymerase (Structure 5, 1109-1122 (1997)), the structure of the Finger domain is disordered except for the net end containing a short helix in which the Finger domain extends to the Thumb domain. The region corresponding to the connecting region between the Holder and Palm domains in the HCV polymerase was identified as the Finger domain, however, most of the rest of the structure in the Finger domain has not been revealed yet.

The Holder domain consists of two helixes, ?H and ?I, located as if supporting this region, a part of each of ?C, ?D, ?E, and ?F, and a long loop that looks like it is inserted into the Finger and Palm domains between ?D and ?E. This domain forms a valley which is one wall of the cone shape between the Palm domain and this domain, and the U-shaped valley between the Finger domain and the domain. In two valleys, basic amino acid residues align, which are positively charged. The positively charged surface conveniently binds to a negatively charged template, and therefore, the U-shaped valley is considered to be an entrance for template RNA.

The Palm domain comprises a structure similar to HIV reverse transcriptase, *E. coli*, or Taq DNA-dependent DNA polymerase and T7 DNA-dependent polymerase.

The Thumb domain consists of six binding helixes, ?P helix, and two distorted ? sheets connecting to the Palm domain. The core structure of this domain comprises a structure similar to the HIV reverse transcriptase. The ? sheet extending from the apex of the Thumb domain consists of nonhydrophilic residues, except for the hydrophilic junction, and hangs down to the center of the cone shape, as if pushing the C-terminal nonhydrophilic region. This characteristic long apex is not observed in other polymerases. In

fact, the C-terminus-deficient variant has a reportedly high RNA-dependent RNA polymerase activity (J. Virol. 73, 1649-54 (1999)). C-terminal nonhydrophilic region is thought to be involved with membrane adhesion and to have a function in stabilizing the cone shape.

The N-terminus of the HCV polymerase forms a mimic ? sheet at the center of the Finger domain with ?5. This means that N-terminus-truncated variants lose the replicase activity.

[0023]

5

15

20

25

30

35

10 [Example 3]

Determination of the active site and the additional inhibitor-binding site in the HCV polymerase

As described above, the Palm domain of the HCV polymerase has a structure similar to HIV reverse transcriptase, *E. coli* or Taq DNA-dependent DNA polymerase, and T7 DNA-dependent polymerase. Comparison of the conserved region between the active site of these known Palm domains and the Palm domain of the HCV polymerase deduced that the active site is

(1) the space formed by Asp 220, 318, and 319, and conserved residues between ?1 and ?2 of the Fingers domain, Lys 141 and Arg 158, and (2) the hydrophilic cavity, receiving 2'-OH in ribose of rNTP, formed by Ser 282, Thr 287, and Asn 291, conserved in proximity to position 225.

Fig. 3 compares the amino acid sequences of the HCV polymerase, poliovirus polymerase, and HIV reverse transcriptase. HCV, POLIO, and HIVRT in the figure indicate HCV polymerase, poliovirus polymerase, and HIV reverse transcriptase, respectively. The underlined sequences indicate the parts where the structures have not been clarified by the above structure analysis.

Asp 225 corresponds to Tyr 115 of the HIV reverse transcriptase and this difference of the amino acids presumably determines whether the substrate is rNTP or dNTP. Arg 158 and Lys 141, the conserved residues between ?1 and ?2 of the Fingers domain, would have an important role in the binding of rNTP.

The Thumb domain of the HCV polymerase can structurally move against the Palm and Fingers domains and this movement results in

the inner space of the Palm domain. This space was confirmed to be formed by the regions of amino acids 213 to 223, 310 to 325, and 348 to 366, by considering the crystal structure thereof. A compound existing in this space presumably inhibits the spatial formation. It is rationally assumed that the above-described region of the Palm domain is an additional inhibitor-binding site. The inner space was revealed to be an additional inhibitor-binding site for HCV polymerase. The region may thus shift 1 to 20, preferably 1 to 10, and more preferably 1 to 5 amino acids.

Lys 90, 98, and 172, and Arg 106 and 168 in the Holder domain, Arg 48 in the Finger domain, and Arg 465 in the Thumb domain are located within 5 Å from the phosphodiester of the template in the template/primer binding model. These amino acids would have an important role on the binding of the template/primer.

15

20

10

5

[0024]

[Effects of the Invention]

The present invention allows the selection of compounds having HCV polymerase-inhibiting activity using computers and such. A leading compound and derivative peripheral compounds can be rationally designed. Furthermore, in synthesis experiments, useless synthesis can be obviated, and biological activity tests can be efficiently performed.

25 [0025]

[Sequence Listing]

SEQUENCE LISTING

<110> Japan Tobacco Inc.

3 0

<120> HCV polymerase for crystal structure analysis and use of the crystal structure

<130> J99-0250

3 5

<140>

<141>

<150> JP P1999-188630

<151> 1999-07-02

5

<160> 4

<170> Patentin Ver. 2.0

10 <210> 1

<211> 578

<212> PRT

<213> Artificial Sequence

15 <220>

<223> Description of Artificial Sequence:artificial protein based on HCV polymerase.

<400> 1

Ser Met Ser Tyr Thr Trp Thr Gly Ala Leu lle Thr Pro Cys Ala Ala 1 5 10 15

Glu Glu Ser Lys Leu Pro IIe Asn Ala Leu Ser Asn Ser Leu Leu Arg 20 25 30

25

His His Asn Met Val Tyr Ala Thr Thr Ser Arg Ser Ala Gly Leu Arg 35 40 45

GIn Lys Lys Val Thr Phe Asp Arg Leu GIn Val Leu Asp Asp His Tyr 50 55 60

Arg Asp Val Leu Lys Glu Met Lys Ala Lys Ala Ser Thr Val Lys Ala 65 70 75 80

Lys Leu Leu Ser Val Glu Glu Ala Cys Lys Leu Thr Pro Pro His Ser 85 90 95

	Ala	Lys	Ser	Lys 100	Phe	Gly	lyr	Gly	105	Lys	Asp	Val	Arg	110	Leu	Ser
5	Ser	Lys	Ala 115	Val	Asn	His	lle	His 120	Ser	Val	Trp	Lys	Asp 125	Leu	Leu	Glu
1 0	Asp	Thr 130	Val	Thr	Pro	lle	Asp 135	Thr	Thr	lle	Met	Ala 140	Lys	Asn	Glu	Val
	Phe 145	Cys	Val	GIn	Pro	GIu 150	Lys	Gly	Gly	Arg	Lys 155	Pro	Ala	Arg	Leu	11e
15	Val	Phe	Pro	Asp	Leu 165	Gly	Val	Arg	Val	Cys 170	Glu	Lys	Met	Ala	Leu 175	Tyr
	Asp	Val	Val	Ser 180	Thr	Leu	Pro	GIn	Va I 185	Val	Met	Gly	Ser	Ser 190	Tyr	Gly
2 0	Phe	GIn	Tyr 195	Ser	Pro	Gly	GIn	Arg 200	Val	Glu	Phe	Leu	Va I 205	Asn	Thr	Trp
2 5	Lys	Ser 210	Lys	Lys	Asn	Pro	Met 215	Gly	Phe	Ser	Tyr	Asp 220	Thr	Arg	Cys	Phe
	Asp 225	Ser	Thr	Val	Thr	Glu 230	Asn	Asp	lle	Arg	Va I 235	Glu	Glu	Ser	lle	Tyr 240
3 0	Gln	Cys	Cys	Asp	Leu 245	Ala	Pro	Glu	Ala	Arg 250	Gln	Ala	He	Lys	Ser 255	Leu
	Thr	Glu	Arg	Leu 260	Tyr	lle	Gly	Gly	Pro 265	Leu	Thr	Asn	Ser	Lys 270	Gly	Glr
3 5	Asn	Cys	Gly 275	Tyr	Arg	Arg	Cys	Arg 280	Ala	Ser	Gly	Val	Leu 285	Thr	Thr	Ser

	Cys	Gly 290	Asn	Thr	Leu	Thr	Cys 295	Tyr	Leu	Lys	Ala	Ser 300	Ala	Ala	Cys	Arg
5	Ala 305	Ala	Lys	Leu	GIn	Asp 310	Cys	Thr	Met	Leu	Val 315	Asn	Gly	Asp	Asp	Leu 320
L O	Val	Val	lle	Cys	Glu 325	Ser	Ala	Gly	Thr	GIn 330	Glu	Asp	Ala	Ala	Ser 335	Leu
	Arg	Val	Phe	Thr 340	Glu	Ala	Met	Thr	Arg 345	Tyr	Ser	Ala	Pro	Pro 350	Gly	Asp
1 5	Pro	Pro	GIn 355	Pro	Glu	Tyr	Asp	Leu 360	Glu	Leu	lle	Thr	Ser 365	Cys	Ser	Ser
	Asn	Va I 370	Ser	Val	Ala	His	Asp 375	Ala	Ser	Gly	Lys	Arg 380	Val	Tyr	Tyr	Leu
2 0	Thr 385	Arg	Asp	Pro	Thr	Thr 390	Pro	Leu	Ala	Arg	Ala 395	Ala	Trp	Glu	Thr	A1a 400
2 5	Arg	His	Thr	Pro	Va I 405	Asn	Ser	Trp	Leu	Gly 410	Asn	lle	lle	Met	Tyr 415	Ala
2 3	Pro	Thr	Leu	Trp 420	Ala	Arg	Met	lle	Leu 425	Met	Thr	His	Phe	Phe 430	Ser	lle
3 0	Leu	Leu	Ala 435	GIn	Glu	Gln	Leu	Glu 440	Lys	Ala	Leu	Asp	Cys 445	Gln	lle	Tyr
	Gly	Ala 450	Cys	Tyr	Ser	lle	G1u 455	Pro	Leu	Asp	Leu	Pro 460	GIn	lle	lle	Glu
3 5	Arg		His	Gly	Leu	Ser		Phe	Ser	Leu	His 475	Ser	Tyr	Ser	Pro	Gly 480

Glu lle Asn Arg Val Ala Ser Cys Leu Arg Lys Leu Gly Val Pro Pro 485 490 495

5 Leu Arg Val Trp Arg His Arg Ala Arg Ser Val Arg Ala Arg Leu Leu 500 505 510

Ser Gln Gly Gly Arg Ala Ala Thr Cys Gly Lys Tyr Leu Phe Asn Trp 515 520 525

10

Ala Val Lys Thr Lys Leu Lys Leu Thr Pro IIe Pro Ala Ala Ser Gln 530 535 540

Leu Asp Leu Ser Gly Trp Phe Val Ala Gly Tyr Ser Gly Gly Asp lle 555 550 560

Tyr His Ser Leu Ser Arg Ala Arg Pro Arg Gly Ser His His His 565 570 575

20 His His

<210> 2

25 (211) 1743

<212> DNA

<213> Artificial Sequence

<220>

30 <223> Description of Artificial Sequence: Artificial nucleic acid sequence based on HCV polymerase.

<400> 2

atgtcaatgt cctacacatg gacaggcgcc ttgatcacgc catgcgctgc ggaggaaagc 60
aagctgccca tcaacgcgtt gagcaactct ttgctgcgcc accataacat ggtttatgcc 120
acaacatctc gcagcgcagg cctgcggcag aagaaggtca cctttgacag actgcaagtc 180

```
ctggacgacc actaccggga cgtgctcaag gagatgaagg cgaaggcgtc cacagttaag 240
     gctaaactcc tatccgtaga ggaagcctgc aagctgacgc ccccacattc ggccaaatcc 300
     aagtttggct atggggcaaa ggacgtccgg aacctatcca gcaaggccgt taaccacatc 360
     cactccgtgt ggaaggactt gctggaagac actgtgacac caattgacac caccatcatg 420
     gcaaaaaatg aggttttctg tgtccaacca gagaaaggag gccgtaagcc agcccgcctt 480
 5
     atogtattoc cagatotegg agtoogteta teogagaaga tegcootota teateteeto 540
     tocaccette eteaggtest gatgggetee teataeggat teeagtacte teetgggeag 600
     cgagtcgagt tcctggtgaa tacctggaaa tcaaagaaaa accccatggg cttttcatat 660
     gacacteget gtttegacte aaeggteace gagaaegaca teegtgttga ggagteaatt 720
     taccaatgtt gtgacttggc ccccgaagcc agacaggcca taaaatcgct cacagagcgg 780
10
     ctttatatcg ggggtcctct gactaattca aaagggcaga actgcggtta tcgccggtgc 840
     cgcgcgagcg gcgtgctgac gactagctgc ggtaacaccc tcacatgtta cttgaaggcc 900
     tctgcagcct gtcgagctgc gaagctccag gactgcacga tgctcgtgaa cggagacgac 960
     ctcgtcgtta tctgtgaaag cgcgggaacc caagaggacg cggcgagcct acgagtcttc 1020
     acggaggeta tgactaggta etcegecece eceggggace egececaace agaatacgae 1080
15
     ttggagctga taacatcatg ttcctccaat gtgtcggtcg cccacgatgc atcaggcaaa 1140
     agggtgtact acctcacccg tgatcccacc accccctcg cacgggctgc gtgggagaca 1200
     gctagacaca ctccagttaa ctcctggcta ggcaacatta ttatgtatgc gcccactttg 1260
     tgggcaagga tgattctgat gactcacttc ttctccatcc ttctagcgca ggagcaactt 1320
     gaaaaagccc tggactgcca gatctacggg gcctgttact ccattgagcc acttgaccta 1380
20
     cctcagatca ttgaacgact ccatggcctt agcgcatttt cactccatag ttactctcca 1440
     ggtgagatca atagggtggc ttcatgcctc aggaaacttg gggtaccacc cttgcgagtc 1500
     tggagacatc gggccaggag cgtccgcgct aggctactgt cccagggggg gagggccgcc 1560
     acttgtggca agtacctctt caactgggca gtgaagacca aactcaaact cactccaatc 1620
     ccggctgcgt cccagctgga cttgtccggc tggttcgttg ctggttacag cgggggagac 1680
25
     atatatcaca gcctgtctcg tgcccgaccc cgcggatccc atcaccatca ccatcactaa 1740
                                                                        1743
     taa
```

<210> 3

30 **<211> 30**

<212> DNA

<213> Artificial Sequence

<220>

35 <223> Description of Artificial Sequence: Artificial nucleic acid sequence for primer.

<400> 3 catatgtcaa tgtcctacac atggacagcc

30

- 5 <210> 4
 - <211> 57
 - <212> DNA
 - <213> Artificial Sequence
- 10 <220>
 - <223> Description of Artificial Sequence: Artificial nucleic acid sequence for protein.
 - <400> 4
- ttattagtga tggtgatggt gatgggatcc gcggggtcgg gcacgagaca ggctgtg 57

[Brief Description of the Drawings]

20 [Fig. 1]

The crystal structure of the HCV polymerase produced by using the program software RasMol is shown.

[Fig. 2]

The crystal structure of the HCV polymerase is schematically

25 shown.

[Fig. 3]

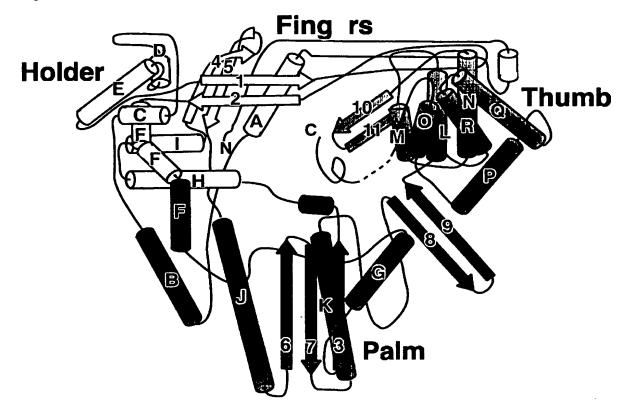
Comparison between amino acid sequences of HCV polymerase, poliovirus polymerase, and HIV reverse transcriptase are shown.

JP11-192488

[Document Name] Drawings [Fig. 1]



[Fig. 2]



[Fig. 3]

						A		В	C	
HCV POLIO HIVRT	:	12345678911234 SMSFTWTGALITPC MRPSKEVGYPIINA KIS	AAEESKLPI PSKTKLEPS	NALSNSLL-RH AFHYV <u>FEGVK</u> E	HNMVYATTSRS/ PAVLTKNDPRLI	AGLRQKKVTFDRL	QVLDDHYRDVL GNKITEVDEYM	KEMKAKASTVKAI	(LLSVEEACKLT	
HCV POLIO HIVRT	:	PPHSAKSKF	GYGAKDVRN DILNKOTRD	LSSKAVNHIHS\ TKEMOKLLDTY(/WKDLLEDTVTP: GINL-PLVTYVKI	IDTTIMAKNEVFC DELRSKTKVEQGK	VQPEKGGRKPAR SRLIEASSGKSR	LIVFPDLGVRVCE LIEASSNDSVAMF	EKMALYDVVSTLPQY RMAFGNLYAAFHKNI	F 200 5678991234567890 VVMGSSYGFQYSPGQR PGVITGSAVGCDPDLF GIPHPAG-
HCV POLIO HIVRT	:	G 12345678911234 VEFLVNTWKSKKNPI WSKIPVLMEE LKKKK	MGFSYDTRO KLFAFDYTG	45678931234 FDSTVTENDIR	567894123450 VEESIYQCCDL/ ALKMVLEKIG-	APEARQAIKSLTE FGDRVDYIC	96123456789 RLYIGGPLTNS YLN <u>HSHHLYKN</u>	KGQNCGYRI KTYCVKGGI	RCRASGVLTTSCGN <u>1PSGC</u> SGTSIFN	π -
POL TO		300 345678901234 LTCYLKASAACR SMINNLIIRTLLLK SSMTKILEPFRK	567891 AAKLQD TYKGTDI DH	CTMEVNGDDEV	23456789312 VICESAGTQEO ASYPH	AASLRVFTEAMTF EVDASLLAOSGKE	YSAPPGDPPQP YGLTMTPADKS	EYDLELITS ATFETVTWENVT	SCSSNVSVAHDASG FLKRFFRADEKY-P	KRVYYKTRD FLIHPVM
HCV POLIO HIVRT		L 400 89912345678901 PTTPLARAAWETAR PMKEIHESIRWTKD LPEKDSWT	HTPVNSWLO	.12345678 NIIMYAPT	92123456789 LWARMILMTHF	FSILLAQEQLEKA SVPIGRA	LDCQIYGACYS	4567896123450 IEPLDLPQIIERI LLLPEYSTLY	LHGLSAFSLHSYSP RRWLDSF	GEINR
HCV POLIO HIVRT	:	5 56789912345678 VASCLRKLGVPPLR								

[Document Name] Abstract [Abstract]

[Objective] The objective of the present invention is to provide recombinant HCV polymerases suitable for crystal analysis and a method for using the structural coordinate thereof.

[Constitution] Novel HCV polymerases whose crystal structure is stabilized and the gene thereof are disclosed. Furthermore, the structural coordinate of an HCV polymerase is determined, and an active site and an additional inhibitor-binding site are identified. Also provided are methods for designing and evaluating HCV polymerase inhibitors by using computers and the structural coordinate of HCV polymerase.

10